

TESIS DE LA CARRERA DE
DOCTORADO EN FÍSICA

**Interferencia y acoplamiento electrón-fonón
en las propiedades de transporte de sistemas
nanoscópicos fuertemente correlacionados**

Leandro Tosi

Autor

Dr. Armando A. Aligia
Director

3 de agosto de 2015

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica

San Carlos de Bariloche
Argentina

Para Natalia.

*"-¿ podrá volar exitosamente?
-Lo hará porque estuviste aquí a mi lado."
The Wind Rises, Hayao Miyazaki*

"We absolutely must leave room for doubt or there is no progress and no learning. There is no learning without having to pose a question. And a question requires doubt. People search for certainty. But there is no certainty. People are terrified -how can you live and not know? It is not odd at all. You can think you know, as a matter of fact. And most of your actions are based on incomplete knowledge and you really don't know what it is all about, or what the purpose of the world is, or know a great deal of other things. It is possible to live and not know."

The Pleasure of Finding Things Out: The Best Short Works of **Richard P. Feynman**

"Contempla cada camino de cerca, entonces hazte esta pregunta crucial: ¿ me lleva el corazón por esta ruta? Si lo hace, entonces el camino es bueno. Si no es así, es inútil."
Carlos Castaneda en Don Juan. Citada para mí por mi amigo Cristian Urbina.

*asato mā sadgamaya
tamasomā jyotir gamaya
mrityormāamritam gamaya*

Resumen

En esta tesis se ha abordado la cuestión del efecto de las correlaciones fuertes y del acoplamiento electrón-fonón en las propiedades de transporte de los sistemas nanoscópicos que exhiben fenómenos de interferencia. Hemos desarrollado un modelo para describir la interferencia en los sistemas interactuantes de muchos cuerpos y caracterizado este modelo en diferentes límites relevantes de alta simetría. El modelo consiste en dos dobletes que están acoplados a un par de cables de fuente-sumidero. De los cuatro coeficientes de acoplamiento, tres se pueden hacer reales y positivos. La fase compleja que queda en uno de los acoplamientos permite tener en cuenta la interferencia y puede ser relacionada con la simetría de los estados y la geometría de la conexión. Las propiedades de transporte se han calculado mediante la extensión de la aproximación *non-crossing* (NCA) fuera de equilibrio en el formalismo de Keldysh. Los resultados muestran las consecuencias de la interacción entre la interferencia cuántica y el efecto Kondo que puede conducir incluso a una conductancia cero causada por la interferencia total destructiva en el límite de alta simetría. También hemos explorado el papel de los grados de libertad orbitales en un sistema de dos puntos cuánticos. Hemos llevado a cabo un cálculo fuera de equilibrio de las propiedades de transporte que describen cualitativamente experimentos recientes. Con el fin de incluir el efecto de las vibraciones, que pueden ser muy importantes en las moléculas, hemos tratado primero el caso de un único doblete en el límite Kondo acoplado a un único modo bosónico. Hemos resuelto el problema completo del acoplamiento a los cables conductores y a los fonones en pie de igualdad con NCA y presentamos el efecto sobre las propiedades de transporte en el régimen Kondo. También presentamos los primeros resultados del efecto de las vibraciones en nuestro modelo de interferencia calculados en equilibrio. En la última parte presento mis resultados experimentales sobre el efecto Hall cuántico entero medido en gases de electrones bidimensionales.

Palabras clave: Efecto Kondo, transporte cuántico, física mesoscópica, interferencia, acoplamiento electrón-fonón, electrónica molecular, aproximación *non-crossing*, sistemas fuertemente correlacionados, efecto Hall cuántico.

Abstract

In this thesis we have addressed the question of the effect of strong correlations and electron-phonon coupling on the transport properties of nanoscopic systems exhibiting interference phenomena. We have developed a model to describe interference in many-body interacting systems and characterized this model in different relevant limits of high symmetry. The model consists on two doublets which are coupled to a pair of source-drain conducting leads. From the four coupling coefficients, three can be made real and positive. The remaining complex phase in one of the couplings allows to take into account the interference. It can be related with the symmetry of the states and with the geometry of the connection. The transport properties have been calculated using the extension of the non-crossing approximation (NCA) out of equilibrium in the Keldysh formalism. The results show the consequences of the interplay between quantum interference and Kondo effect which may lead to a zero conductance due to the total destructive interference in the high symmetry limit. We have also explored the role of orbital degrees of freedom in a double-quantum dot system. We have performed a full out of equilibrium calculation of the transport properties which describe qualitatively recent experiments. In order to include the effect of vibrations, which may be very important in molecules, we have first treated the case of one doublet in the Kondo limit coupled to a single bosonic mode. We have solved the complete problem of the coupling to the conducting leads and the phonons in equal footing with NCA and present here the effect of vibrations on the transport properties in the Kondo regime. We also present the first results of the effect of phonons in our interference model calculated in equilibrium. In the last part I present my experimental results on the integer quantum Hall effect measured on two-dimensional electron gases.

Keywords: Kondo effect, quantum transport, mesoscopic physics, interference, electron-phonon coupling, molecular electronics, non-crossing approximation, strongly correlated systems, quantum Hall effect.

Contenidos

1. De qué va esta tesis	1
2. Revisión Bibliográfica	31
I Interferencia en sistemas fuertemente correlacionados	46
3. Estudio teórico del transporte en sistemas mesoscópicos	47
3.1. Conductancia a partir de la transmisión	48
3.2. El lenguaje de las funciones de Green	55
3.3. Un enfoque general para la corriente	62
4. Un sistema de tres puntos cuánticos como filtro de espín	75
4.1. Introducción	76
4.2. El sistema TQD	76
4.3. Parámetros experimentales	77
4.4. Los posibles estados	78
4.5. El espectro de energía	79
4.6. El Hamiltoniano efectivo de baja energía	80
4.7. Propiedades de transporte	81
4.8. Discusión	85
5. Un modelo para la interferencia en sistemas fuertemente correlacionados	86
5.1. Introducción	87
5.2. Un modelo efectivo para la interferencia	88
5.3. Propiedades de transporte	90
5.4. Encontrando las funciones de Green	91
5.5. Conservación de la corriente	97
6. Explorando el Kondo SU(2) y SU(4)	98
6.1. El efecto Kondo SU(2)	100
6.2. El efecto Kondo SU(4)	108
6.3. SU(4) con un campo de ruptura de simetría	112
6.4. Derivación variacional de la temperatura de Kondo	116

7. La interrelación entre interferencia cuántica y efecto Kondo	118
7.1. Interferencia destructiva total en el límite SU(4)	119
7.2. Picos a voltaje finito	122
7.3. Dependencia con temperatura	124
7.4. Conclusiones	127
8. Transporte a través de una molécula de benceno en el régimen de Kondo	129
8.1. Conexión de los cables a la molécula de benceno	130
8.2. La corriente	133
8.3. Interferencia destructiva parcial	134
8.4. Analogía con la ruptura de simetría SU(4) en el límite de fase $\phi = \pi$	136
8.5. Dependencia de la conductancia con la temperatura	138
8.6. La fase y el desdoblamiento efectivo	139
8.7. Conclusiones	141

II Espectroscopía orbital del efecto Kondo **144**

9. Espectroscopía orbital del efecto Kondo en un sistema de dos puntos cuánticos	145
9.1. El sistema de dos puntos cuánticos	147
9.1.1. Introducción preliminar	147
9.1.2. El Hamiltoniano	153
9.1.3. La corriente	154
9.2. Propiedades de transporte de no equilibrio	154
9.2.1. El caso SU(4)	154
9.2.2. El efecto del desdoblamiento δ	161
9.3. La densidad de estados fuera de equilibrio	168
9.4. La configuración STS	170
9.5. Algunas conclusiones	172
10. Restauración de la simetría SU(4) en un sistema de dos puntos cuánticos	174
10.1. De SU(4) a SU(2) por medio de un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ	175
10.2. El desdoblamiento efectivo: la pérdida de simetría	179
10.3. Restauración de la simetría	180
10.4. Conclusiones	185

III Acoplamiento electrón-fonón **186**

11. El acoplamiento a un modo bosónico	187
11.1. El Hamiltoniano electrón-fonón	189
11.2. Un modelo electrónico efectivo	192

11.2.1. Apagando la hibridación	192
11.2.2. La transformación canónica	194
11.2.3. Estimación variacional del nivel de energía efectivo	196
11.3. La solución numérica dentro de la NCA	198
12. Transporte fuera de equilibrio a través de moléculas magnéticas vibrantes	201
12.1. La densidad de estados en presencia de fonones	201
12.2. La dependencia de T_K con el acoplamiento electrón-fonón.	209
12.3. Densidad espectral y conductancia fuera de equilibrio	211
12.4. Discusión y conclusiones	213
13. Interferencia y fonones en sistemas interactuantes	215
13.1. Acoplamiento electrón-fonón en el modelo de Aligia	216
13.2. El límite SU(2) en presencia de fonones	218
13.3. El límite SU(4) en presencia de fonones	220
13.4. Conclusiones parciales	225
IV Hacia experimentos de transporte en 2DEGs	226
14. Fabricación en gases de electrones bidimensionales	227
14.1. Un gas bidimensional de electrones	227
14.2. Fabricación sobre 2DEGs	238
15. El Efecto Hall Cuántico	242
15.1. El gas bidimensional en presencia de un campo magnético	243
15.2. Propiedades de transporte	248
15.2.1. El efecto Hall cuántico	250
Apéndices	256
A. La caja de herramientas de supervivencia	257
A.1. Funciones de Green a temperatura cero	258
A.2. Introduciendo los diagramas	259
A.3. Ejemplo: El nivel resonante	264
A.4. Funciones de Green a temperatura finita	272
A.5. Ejemplo: la NCA	279
A.6. Funciones de Green de no-equilibrio	287
A.7. Ejemplo: El cálculo de la corriente	295
A.8. La corriente en un conductor no interactuante	301
B. La aproximación <i>non-crossing</i>	305
B.1. El Hamiltoniano y las expresiones diagramáticas	305
B.2. Expresiones analíticas	306
B.3. La función de Green física	311

B.4. La proyección en el espacio de $Q = 1$	313
C. NCA fuera de equilibrio	320
C.1. Modelo	320
C.2. Representación en términos de partículas auxiliares	321
C.3. El propagador físico en la representación de partículas auxiliares	322
C.4. Expansión diagramática NCA	323
C.5. Expresiones analíticas	329
C.6. Funciones de Green retardadas y avanzadas	331
D. Detalles del cálculo de la espectroscopía del Kondo orbital	333
D.1. Cálculo numérico dentro la aproximación <i>non-crossing</i>	333
D.2. Conservación de la corriente	337
E. Solución numérica para el acoplamiento electrón-fonón con NCA	339
E.1. El modelo	339
E.2. La aproximación <i>non-crossing</i>	340
E.3. Expresión analítica para las nuevas auto-energías	344
E.4. Caso especial: un nivel y un solo modo de vibración	346
Bibliografía	347

De qué va esta tesis

“Why would anyone still want to study a physical phenomenon that was discovered in the 1930s, explained in the 1960s and has been subject to numerous reviews since 1970s? Although Kondo effect is a well known and widely studied phenomenon in condensed-matter physics, it continues to capture the imagination of experimentalists and theorists alike”

Leo Kouwenhoven, Leonid Glazman

The revival of the Kondo effect, Physics World, January (2001)

En esta tesis presento mis resultados teóricos y experimentales sobre el transporte eléctrico en sistemas meso y nanoscópicos.

El estudio de las propiedades de transporte de sistemas mesoscópicos se convirtió en un área de investigación muy activa motivada por los avances en las capacidades experimentales y por el impulso continuo hacia la miniaturización de los circuitos electrónicos. Comenzando en los '80 con el estudio de las propiedades de transporte de gases de electrones bidimensionales de alta movilidad en los que se descubrió el efecto Hall cuántico y la cuantización de la conductancia, la rápida mejora de las técnicas de fabricación abrió la posibilidad de explorar la naturaleza cuántica del transporte en una gran variedad de sistemas incluyendo aquellos con correlaciones fuertes. Creciendo a la par, la teoría del transporte en sistemas mesoscópicos fue de vital importancia ya que desde las propuestas teóricas surgieron experimentos interesantes y fue posible un entendimiento más profundo de los fenómenos observados. La descripción del transporte en conductores coherentes en términos de canales de conducción y el cálculo de la corriente en términos de coeficientes de transmisión resultantes de una matriz de dispersión son la más destacada herencia de este tratamiento teórico de una partícula.

En la medida en que las dimensiones del sistema se reducen, las interacciones entre los electrones se vuelven más relevantes y otros fenómenos ocurren. Esto fue notado tempranamente en experimentos usando junturas tunel donde la carga de una isla metálica pudo ser controlada y cambiada un electrón por vez. La posibilidad de tener *tunneling* de electrón único en este dispositivo está basada en el efecto de bloqueo de Coulomb, el cual es una consecuencia del costo energético que significa la adición de un nuevo electrón en la pequeña isla. El efecto de la interacción electrón-electrón fue también observado en gases de electrones bidimensionales en semiconductores

donde los electrones pueden ser confinados en pequeñas regiones creadas con potenciales electrostáticos. El confinamiento da lugar a un conjunto de estados localizados con un espectro discreto de energías. Por la similitud en sus propiedades, estas regiones confinadas son llamadas átomos artificiales o puntos cuánticos y no son exclusivos de los semiconductores. En ciertos aspectos de las propiedades de transporte, las moléculas colocadas entre dos electrodos metálicos, por ejemplo, también pueden ser descritas como puntos cuánticos. Cuando los puntos cuánticos son muy pequeños, la repulsión coulombiana es relevante ya que el costo energético de tener dos electrones en el mismo estado localizado es grande. En particular, cuando hay un número impar de electrones en el punto cuántico, un nivel de energía degenerado puede ser ocupado por un electrón con espín para arriba o para abajo. Dado que el punto cuántico está conectado a electrodos metálicos, los electrones de conducción en la fuente y el sumidero pueden ocupar este estado y así mismo, un electrón en el estado localizado puede saltar hacia los reservorios. El sistema en este régimen se comporta como una impureza magnética con espín $1/2$ rodeada del mar de electrones de un metal. Hay procesos de *tunneling* que están acompañados por una inversión del espín. Estos traen como consecuencia la formación de un estado a bajas temperaturas que entrelaza electrones de conducción y electrones localizados en un singlete. Este es el llamado efecto Kondo y ha sido observado en una gran variedad de sistemas experimentales. La ventaja de la realización del efecto Kondo en sistemas nanoscópicos es el gran control sobre los parámetros y la posibilidad única de llevar adelante pruebas impensables para impurezas magnéticas en metales. Como puede sospecharse, la descripción de las propiedades de transporte en presencia de interacciones fuertes requiere de un tratamiento más sofisticado. Para sistemas altamente correlacionados las herramientas apropiadas son las de la física de muchos cuerpos. Entre otros fenómenos, una descripción del bloqueo de Coulomb y del efecto Kondo en puntos cuánticos es posible en este contexto.

Los resultados principales de esta tesis están relacionados con las propiedades de transporte en sistemas interactuantes. Durante estos años la pregunta que hemos buscado responder es el rol de la interacción electrón-electrón y del acoplamiento electrón-fonón en la descripción de los fenómenos de interferencia en sistemas mesoscópicos. A través del estudio de diferentes problemas hemos obtenido respuestas muy interesantes, aunque parciales, a esta difícil pregunta. La interferencia cuántica es una de las manifestaciones emblemáticas de la coherencia de fase en un conductor mesoscópico. Es una prueba de la naturaleza ondulatoria de los portadores y de la importancia de la fase compleja de la función de onda. En una imagen simplificada los electrones pueden viajar desde la fuente al sumidero siguiendo diferentes caminos en el interior del conductor. La interferencia puede ser entendida como resultado de una posible diferencia de fase entre estos caminos. En presencia de interacciones electrón-electrón la noción de trayectoria de un electrón es menos evidente. En arreglos de puntos cuánticos con forma de anillo o en moléculas como anulenos, donde la interferencia

puede ocurrir, los estados del sistema son descriptos por funciones de onda de muchos cuerpos. Los “caminos electrónicos” posibles tienen que ser reinterpretados, así como el significado de la diferencia de fase. Nuestra primera contribución es un modelo para describir la interferencia en sistemas interactuantes.

Hemos explorado este modelo en los límites interesantes en los que se desarrolla el efecto Kondo y estudiamos la interrelación entre la interferencia cuántica y las correlaciones electrón-electrón. Observamos que en una condición de alta simetría es posible observar interferencia destructiva total. Como un caso particular aplicamos el modelo para estudiar la física de baja energía de una molécula de benceno conectada de diferentes maneras en los seis sitios disponibles. Cuando la fuente y el sumidero se conectan formando un ángulo de 120 grados (posición *meta*) hay un efecto de interferencia destructiva parcial y la conductancia diferencial muestra la presencia de picos satélite a voltaje finito como consecuencia de las correlaciones orbitales. Nosotros consideramos que estas particularidades deberían ser observables en un experimento.

Los grados de libertad orbitales que son fundamentales para dar cuenta de los fenómenos de interferencia también fueron recientemente propuestos como una forma inteligente de realizar la espectroscopia de la función de onda de muchos cuerpos en el régimen de Kondo. El grupo de Goldhaber-Gordon [Amasha et al., 2013] reportó un experimento de espectroscopía de la estructura orbital del Kondo en un sistema de dos puntos cuánticos donde los mismos son mutuamente interactuantes y cada uno está conectado a su propio par de contactos de fuente y sumidero. En un sistema de dos puntos cuánticos acoplados capacitivamente es posible tener un régimen donde dos configuraciones de carga son equivalentes. En este caso, la ocupación de un punto cuántico (QD1) o el otro (QD2) es como un índice de pseudo-espín. Hay un estado cuatro veces degenerado en donde no solo las correlaciones de espín, sino también las de pseudo-espín (es decir orbitales) son relevantes. Bajo ciertas condiciones, los posibles procesos que implican a los electrones de conducción conducen a un efecto Kondo a bajas temperaturas que puede ser descrito por un modelo con simetría $SU(4)$. Las propiedades de transporte en este régimen muestran las principales características del efecto Kondo con $SU(4)$. En el contexto de nuestro modelo de interferencia, en el caso de mayor simetría el mismo también tiene simetría $SU(4)$. Propuse modificar ligeramente nuestro modelo para estudiar el problema de los dos puntos cuánticos. Hicimos un estudio muy completo de las propiedades de transporte para este problema interactuante fuera de equilibrio. Encontramos características muy interesantes en las conductancias a través de QD1 y QD2 en función de los voltajes aplicados como consecuencia de las correlaciones cruzadas en el régimen de Kondo. Hay contribuciones inelásticas relacionadas con una modificación de las densidades de estados respecto al equilibrio. Quiero hacer hincapié en que se trata de un problema muy complicado, al menos si el cálculo de las propiedades de transporte se realiza utilizando algún formalismo fuera de equilibrio. Encontramos un acuerdo

cualitativo con los resultados experimentales. Presento una discusión sobre las condiciones utilizadas en el experimento para realizar espectroscopía ya que el acoplamiento a los contactos de voltaje es muy similar y la caída de tensión es bastante simétrica (al contrario de lo que cabría esperar en un caso de espectroscopía túnel). También hemos analizado el efecto de un campo que rompe la simetría entre las dos configuraciones de carga. Las energías relativas de los niveles localizados en los puntos cuánticos se pueden (de-)sintonizar con potenciales electrostáticos. El efecto es como un desdoblamiento pseudo-Zeeman que rompe la degeneración orbital. Dado que la degeneración de espín se mantiene, hay un *cross-over* hacia un efecto Kondo con simetría SU(2). Algunas de las consecuencias de este desdoblamiento serían observables en un experimento. Un punto importante que abordamos es que a los fines de tener simetría SU(4) ambos acoplamientos totales a los cables (fuente más sumidero) tienen que ser los mismos. Esto es muy difícil de lograr experimentalmente pero como mostramos, la simetría SU(4) puede ser restaurada de manera efectiva ajustando adecuadamente las energías de los niveles para compensar la diferencia de los acoplamientos.

El uso de moléculas para construir transistores moleculares y otros dispositivos electrónicos (diodos, interruptores, puertas lógicas) es un área de investigación muy activa en la actualidad. El estudio del transporte a través de moléculas ha exigido el desarrollo de nuevas técnicas experimentales y también nuevas herramientas teóricas para dar una caracterización más precisa del sistema: molécula más electrodos. En particular, estamos interesados en las moléculas ya que han demostrado presentar efectos de interferencia en el transporte. Sin embargo, sus propiedades de transporte se ven notoriamente afectadas por fonones: una descripción de los fenómenos de interferencia es, por lo tanto incompleta si el efecto del acoplamiento de electrones y fonones no se tiene en cuenta. En las moléculas, los orbitales moleculares son los responsables de las propiedades de transporte y la repulsión de Coulomb, así como la respuesta elástica pueden ser importantes. La pregunta es si la interferencia puede sobrevivir incluso en presencia de fonones. Hemos estudiado primero el efecto de fonones con sólo un nivel localizado en el régimen de Kondo. Hemos encontrado que, como consecuencia de los fonones, hay picos adicionales en la conductancia diferencial a bajas temperaturas. Estos picos satélite corresponden a las réplicas del pico Kondo. Como consecuencia de las correlaciones, los electrones de conducción y los electrones localizados se entrelazan formando el singlete Kondo por debajo de una temperatura característica T_K , la temperatura de Kondo. Discutimos la dependencia de T_K con el acoplamiento electrón-fonón, que según nuestros resultados no es exponencial, sino mucho más suave. Este estudio de un solo nivel es un paso preliminar antes de tratar el efecto de las vibraciones en el contexto de nuestro modelo de interferencia. Este es un trabajo en curso.

He organizado la tesis cuidando de dar un tratamiento adecuado a todas las piezas, haciendo hincapié en nuestro propósito de ponerlas juntas.

La tesis se divide en cuatro partes. En la **primera parte** motivo (**Capítulo 4**) e introduzco (**Capítulo 5**) nuestro modelo de interferencia. Presento los resultados de algunos límites interesantes en equilibrio en el **Capítulo 6** y nuestro estudio de la interrelación entre efectos de interferencia cuántica y correlaciones electrón-electrón en el régimen de Kondo observada en las propiedades de transporte de no equilibrio en el **Capítulo 7**. La aplicación del modelo a la molécula de benceno se discute en el **Capítulo 8**. En la **segunda parte** el problema de los grados de libertad orbitales en el sistema de dos puntos cuánticos se analiza en el **Capítulo 9** y la restauración efectiva de la simetría $SU(4)$ se explica en el **Capítulo 10**. En la **tercera parte** presento nuestros resultados sobre el efecto del acoplamiento electrón-fonón. El Hamiltoniano modelo y algunos límites se introducen en el **Capítulo 11** y las propiedades de transporte y el efecto de los fonones en el régimen de Kondo se discuten en el **Capítulo 12**. He dejado algunos resultados preliminares del efecto de los fonones en nuestro modelo de interferencia para el **Capítulo 13**. Ha sido un objetivo de todo el trabajo teórico realizado permanecer en un estrecho diálogo con los experimentos. El punto de vista es el de un físico experimental que busca configuraciones factibles y rangos de parámetros accesibles. Espero haber alcanzado esta meta.

Al principio de mi tesis se vislumbró la posibilidad de empezar con una línea experimental de transporte a través de sistemas mesoscópicos. He dedicado una gran cantidad de tiempo a la realización de experimentos en gases de electrones bidimensionales. En la **cuarta parte** resumo los primeros pasos en esta dirección y mis resultados sobre efecto Hall cuántico medido a un campo magnético de 16 Tesla y a una temperatura de 35 mK.

Parte I: Interferencia en sistemas fuertemente correlacionados

Uno de los indicadores de la naturaleza cuántica del transporte en sistemas mesoscópicos es la presencia de interferencia. Como ejemplo, se ha informado en anillos metálicos de oro de tamaño micrométrico [Webb et al., 1985] [Chandrasekhar et al., 1985] la ocurrencia de oscilaciones en la conductancia como una función del flujo magnético que atraviesa el anillo. Esta es una manifestación del efecto Aharonov-Bohm [Aharonov and Bohm, 1959] y pone en evidencia la naturaleza ondulatoria de las partículas en los sistemas cuánticos. Como se muestra en la Fig. 1.1(a) los electrones que van desde 1 hasta 2 pueden tomar dos caminos diferentes, denominados A y B. Haciendo un análisis de las contribuciones dominantes¹, se puede considerar que cada uno de estos caminos está pesado por una amplitud t_A y t_B , cuyo módulo al cuadrado da la probabilidad de transmisión de un electrón

¹El análisis a continuación es incompleto ya que no tiene en cuenta los múltiples caminos posibles mediante los cuales un electrón puede ir de 1 a 2. El problema está más bien planteado como una doble rendija. El análisis permite igualmente discutir los puntos importantes que se pretende remarcar.

por A o B.

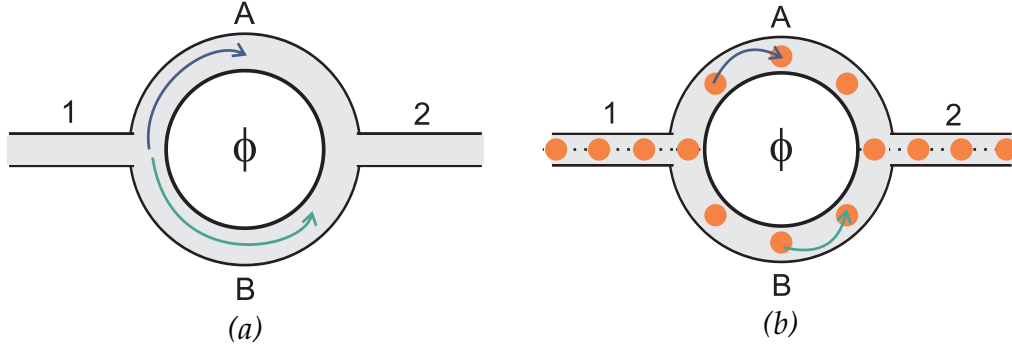


Figura 1.1: (a) Esquema del transporte a través de un anillo metálico atravesado por un flujo magnético ϕ . Los electrones pueden ir del punto 1 al 2 a través del brazo A o B. (b) Modelo discreto del anillo como un arreglo de N -sitios en forma de anillo.

Con el fin de calcular las propiedades de transporte, la corriente eléctrica puede ser relacionado con la probabilidad de un electrón para ir de 1 a 2. En otras palabras, puede ser relacionado con la transmisión $T_{1 \rightarrow 2}$, que es el módulo al cuadrado de la suma de las amplitudes

$$T_{1 \rightarrow 2} = |t_A + t_B|^2.$$

Es posible avanzar en el cálculo introduciendo un modelo discreto para el anillo. Como se muestra en la Fig. 1.1(b), el anillo es descrito por un arreglo de sitios utilizando un modelo de enlace fuerte. Todos los sitios tienen la misma energía y la amplitud del salto de un sitio a otro es t (considerada real). En presencia de un campo magnético, la fase de la función de onda se modifica para incluir el potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Esto puede ser tenido en cuenta con una amplitud de salto efectiva $\tilde{t}_{mn} = t e^{\frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_n) \cdot (\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)}$, del sitio n a m . Las amplitudes resultan

$$t_{A/B} = t e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{A/B} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l}} = t e^{i \varphi_{A/B}},$$

donde $\varphi_{A/B}$ es la fase acumulada en ruta A o B. Está claro que $T_{1 \rightarrow 2}$ depende sólo de la diferencia de fase de las trayectorias $\varphi_A - \varphi_B$. Esta puede a su vez ser relacionada con el flujo magnético ϕ dentro de la superficie del bucle S , $\varphi_A - \varphi_B = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} = BS = \phi$, de este modo

$$T_{1 \rightarrow 2} = |t_A|^2 + |t_B|^2 + 2 |t_A| |t_B| \cos \left(2\pi \frac{e}{\hbar c} \phi \right),$$

que es periódica en el cuanto de flujo $\phi_0 = \frac{\hbar c}{e}$ como se encuentra en los experimentos.

Este sencillo cálculo ilustra el fenómeno cualitativo estudiado en la **primera parte** y también los ingredientes principales a tener en cuenta. En primer lugar, para calcular la conductancia, se necesita la transmisión [Landauer, 1970], que a su vez significa que las amplitudes de los diferentes caminos tienen que ser calculadas. Esto se puede hacer en términos de propagadores o funciones de Green de un modo muy general [Fisher and Lee,

1981]. Para el cálculo de estas funciones de Green, la información completa del sistema entra en juego. En segundo lugar, una vez que se conocen los propagadores (quizás en alguna aproximación), hay un parámetro externo, como ser el flujo magnético que controla la diferencia de fase y sintoniza la interferencia. Hay, sin embargo, un punto importante para remarcar. Estamos interesados en los sistemas que son interactuantes. En este caso, no es posible mantener una imagen de un electrón y calcular las propiedades de transporte como en el ejemplo.

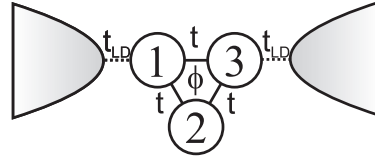


Figura 1.2: Esquema de un arreglo triangular de tres puntos cuánticos conectado a dos cables conductores. Hay un flujo magnético ϕ que atravieza el sistema. Los parámetros relevantes son amplitudes de tunneling entre los puntos cuánticos t y el acoplamiento de los puntos 1 y 3 con los cables t_{LD} .

Un sistema de tres puntos cuánticos

Como motivación de este problema, en lugar de un anillo metálico modelado con un arreglo de sitios discretos, se puede considerar un sistema formado solamente por tres puntos cuánticos. Han habido realizaciones experimentales de arreglos triangulares de tres puntos cuánticos [Gaudreau et al., 2012] [Seo et al., 2013] como el que se esquematiza en la Fig. 1.2.

Los parámetros relevantes para cada punto cuántico son las energías de los niveles localizados y la repulsión de Coulomb. Como se muestra en la figura, hay una amplitud de salto t entre los puntos que tomamos como nuestra unidad de energía ($t = 0.23 \text{ meV}$) y un elemento de matriz de acoplamiento de los sitios 1 y 3 a los conductores t_{LD} . Además, hay un flujo ϕ atravesando el triángulo que se puede incluir como una amplitud de salto efectiva entre los puntos cuánticos. Éstos además son mutuamente interactuantes, es decir, la repulsión electrón-electrón no es despreciable entre ellos y el estado de carga de un punto afecta a los demás ². Como se discute en el **Capítulo 4**, hemos considerado sólo un nivel relevante en cada sitio y tomado parámetros experimentales. Si el sistema de tres puntos cuánticos es asimétrico y la energía en el sitio 2 es mucho más pequeña, esta ocupación siempre se ve favorecida. Exploramos este régimen que se ha propuesto como un filtro de espín [Delgado et al., 2008]. Si hay tres niveles, es posible tener en principio seis electrones en total. Hemos considerado los casos de un y dos electrones. Las energías propias del sistema desacoplado de los contactos como función del flujo magnético se muestran en el panel superior de la Fig. 1.3. En el caso de que hay sólo un electrón en los tres puntos

²Esto puede conducir a una frustración de carga en el triángulo [Seo et al., 2013]

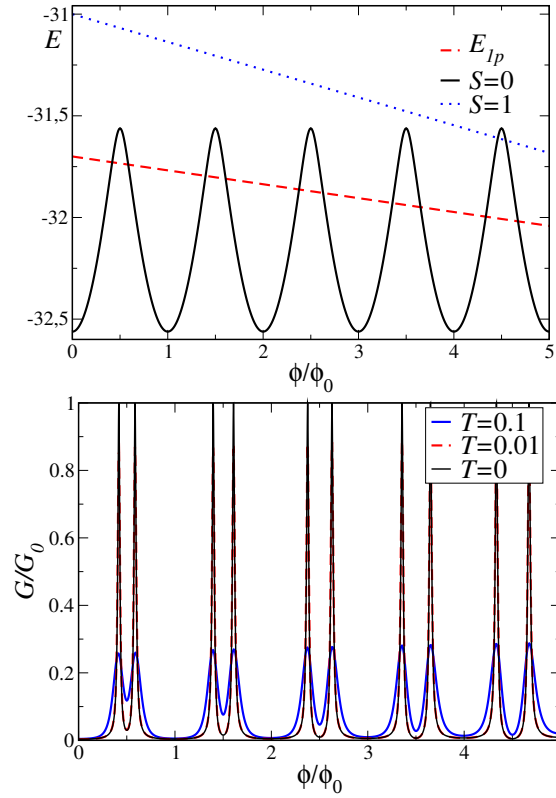


Figura 1.3: (arriba) Auto-energías en función del flujo magnético en unidades de la cuanto de flujo. Los resultados corresponden a tener en total un electrón (línea roja punteada) y dos electrones en el sistema en una configuraciónn singlete (línea de color negro continua) o triplete (línea azul punteada). La unidad de energía es $t = 0.23 \text{ meV}$. (abajo) Conductancia G en unidades de $G_0 = e^2/h$ como una función del flujo magnético para varias temperaturas.

cuánticos (línea roja discontinua), este ocupa el sitio 2 y su energía sólo se ve afectada por el efecto Zeeman. Dado que la orientación del campo magnético es arbitraria, elegimos que este electrón tenga espín hacia arriba. En el caso de dos electrones, hay muchos estados posibles que se pueden clasificar de acuerdo con el espín total. El estado fundamental es un singlete (línea de color negro en la figura) y su energía oscila con el campo magnético. Los puntos importantes para las propiedades de transporte son los **crucos de niveles**. En estos puntos, los estados fundamentales de uno y dos electrones se vuelven degenerados. La probabilidad de que un electrón entre o salga del sistema de tres puntos cuánticos es máxima en estos valores de campo. Esto da lugar a los picos observados en la conductancia que se muestra en el panel inferior de la Fig. 1.3 como función del flujo magnético. Para poder formar el singlete, el electrón que lleva la corriente tiene el espín para abajo. La corriente está por lo tanto polarizada en espín y puede ser cambiada entre los estados de alta-baja corriente con el campo magnético. Este sistema se comporta como una válvula de espín [Tosi and Aligia, 2011]. Cerca de los puntos de degeneración, es posible describir la física de baja energía con un modelo efectivo. La conductancia entre los electrodos conductores

a izquierda y derecha se puede obtener de la transmitancia a través de este sistema efectivo. De este modo es como se obtiene el resultado de la Fig. 1.3. En este modelo hay un nivel sin-espín cuya energía es la diferencia entre las energías de los estados fundamentales de uno y dos electrones. Este modelo da la descripción correcta siempre que el desdoblamiento Zeeman es grande. Si los estados de espín hacia arriba y hacia abajo son cuasi-degenerados, este modelo efectivo simple tiene que ser abandonado.

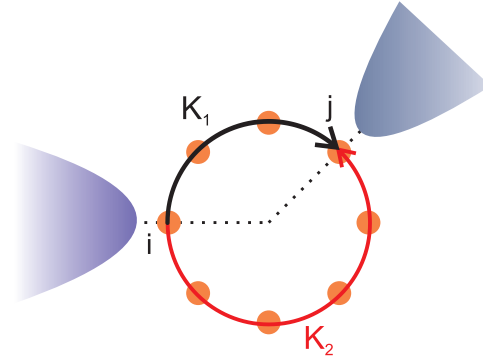


Figura 1.4: Representación esquemática del transporte a través de un sistema interactuante que presenta fenómenos de interferencia. La fuente (sumidero) está conectada al sitio i (j). Hay dos estados de muchos cuerpos muy cercanos en energía que puede ser etiquetados como K_1 y K_2 según su simetría. Estos son los estados que pueden ser ocupados y que pueden acumular una fase diferente.

El modelo de Aligia

El transporte a través del sistema de tres puntos cuánticos pone de manifiesto la importancia de los cruces de niveles en los que estados fundamentales con diferente número de electrones se vuelven degenerados. En los sistemas interactuantes la **interferencia cuántica** puede aparecer cuando **dos** estados de $N \pm 1$ electrones se vuelven degenerados con un estado de N electrones³. Como se ilustra en la Fig. 1.4, los dos estados de muchos cuerpos pueden ser etiquetados por K_1 y K_2 según su simetría⁴. Estos son los estados que comunican los sitios i (fuente) y j (sumidero). La ocupación de cualquiera de estos estados de muchos cuerpos es equivalente a la elección de los “caminos” en el anillo. Está claro que dependiendo de la simetría de los estados y de la geometría de la conexión, es posible tener una diferencia de fase [Rincón et al., 2009]. Como se observó en el caso de los tres puntos cuánticos, la física de baja energía puede describirse con un modelo efectivo. En el **Capítulo 5** presentamos nuestro modelo para el tratamiento de la interferencia en sistemas interactuantes: el *modelo de Aligia* [Roura-Bas et al.,

³Considerar dos estados es desde luego el caso más simple, pero es suficiente.

⁴Para hacerse una buena idea, puede pensarse que estos son estados de Bloch en un sistema finito con simetría de traslación (como un anillo de n sitios) etiquetados con dos vectores de onda posibles.

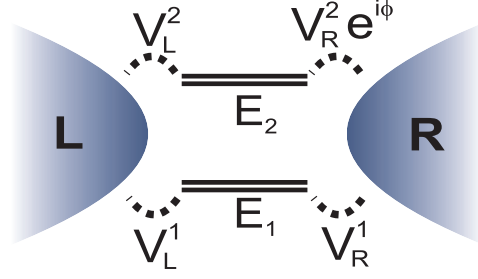


Figura 1.5: Representación esquemática del modelo de Aligia para el tratamiento de la interferencia en los sistemas interactuantes. En el modelo hay dos dobletes con energías E_1 y E_2 que corresponden a la diferencia de energía entre los estados fundamentales de N y $N \pm 1$ electrones. Los elementos de matriz del acoplamiento al cable de la izquierda (L) y derecha (R) son V_ν^i , con $\nu = L, R$ e $i = 1, 2$. Tres de los cuatro acoplamientos se pueden hacer reales con transformaciones de calibre. Hay un acoplamiento que sigue siendo complejo cuya fase ϕ permite tener en cuenta los efectos de interferencia.

[2011]. Es uno de los ingredientes principales de las contribuciones teóricas presentadas en esta tesis.

Un esquema de nuestro modelo se muestra en la Fig. 1.5. La diferencia de energía entre el estado fundamental con N electrones y los dos estados con $N \pm 1$ electrones son E_i ($i = 1, 2$). Consideramos N par, por lo tanto, los niveles de energía son dobletes. El acoplamiento de los estados de muchos cuerpos con los conductores puede obtenerse a partir de la superposición de las funciones de onda. En el modelo la conexión a la izquierda (L) y derecha (R) se tiene en cuenta con los acoplamientos V_ν^i , donde $\nu = L, R$. Tres de los cuatro acoplamientos se pueden hacer reales mediante transformaciones de calibre. Hay un acoplamiento que sigue siendo complejo. La fase ϕ en $V_R^2 = |V_R^2|e^{i\phi}$ representa la diferencia de fase en el transporte entre los estados de muchos cuerpos. El modelo describe la física de baja energía cerca de los puntos de degeneración. Contempla la adición de un electrón extra (o un hueco). La adición de más electrones o huecos no se tiene en cuenta. De hecho, esto puede corresponder a otros estados fundamentales y por lo tanto a otros cruces. En el modelo, esto significa que la doble ocupación de los dobletes está prohibida. Es como tener una repulsión de Coulomb infinita entre e intra-niveles. El modelo es en sí mismo interactuante y difícil de resolver pero permite describir los fenómenos de interferencia y la interrelación con correlaciones electrón-electrón, en particular con el efecto Kondo [Roura-Bas et al., 2011].

Con el fin de resolver el modelo de Aligia usamos una aproximación numérica llamada aproximación *non-crossing* (NCA, aproximación sin cruzamientos) [Coleman, 1984] [Brickers et al., 1987] que ha demostrado ser apropiada para resolver el modelo Anderson fuera de equilibrio [Wingreen and Meir, 1994]. Me parece que la NCA es una técnica muy útil y por lo tanto he decidido incluir una derivación extendida y algunos detalles en los **Apéndice A, B y C**, lo que hace más accesible su comprensión y su implementación. La NCA tiene sus ventajas y desventajas. Una de las desventajas

importantes es que no satisface las propiedades del líquido de Fermi a temperaturas muy bajas. Sin embargo, es una aproximación que incluye contribuciones a todos los órdenes en perturbaciones en la hibridación y da bien la temperatura de Kondo [Costi et al., 1995]. Con respecto a las ventajas, en primer lugar, en comparación con otras técnicas es bastante simple de extender la aproximación y trabajar con dos (o más) dobletes. Esto es esencial para nosotros. El costo computacional de otras técnicas más robustas como el grupo de renormalización numérica (NRG) es muy alto. En segundo lugar, una de las grandes ventajas es que la NCA se puede extender a resolver el problema fuera de equilibrio. Hay una expresión general derivada por Meir y Wingreen para calcular las propiedades de transporte en sistemas interactuantes [Meir and Wingreen, 1992]. Como se discute en el **Capítulo 3**, el uso de este formalismo se basa en el cálculo de funciones de Green de no-equilibrio. En este sentido, nuestros resultados son muy generales y cercanos a los experimentos, que funcionan a temperatura y voltaje finito. En algunos casos, un cálculo de no-equilibrio no es necesario ya que a voltaje pequeño las propiedades de transporte se pueden obtener en el régimen de respuesta lineal. Sin embargo, en el caso particular de nuestro modelo el acoplamiento a los cables a izquierda y derecha se representa por matrices de hibridación Γ^L y Γ^R , que excepto por el caso de $\phi = 0$, no son proporcionales. No es posible utilizar una hibridación efectiva y simplificar el cálculo de la corriente. Creo que esta es también una importante contribución de esta tesis.

El límite de un doblete

Un estudio de nuestro modelo en algunos límites interesantes se presenta en el **Capítulo 6**. Como punto de partida para la caracterización de este modelo desacoplamos uno de los niveles: $V_L^2 = V_R^2 = 0$ y estudiamos una condición simétrica $|V_L^1| = |V_R^1| = V$ (véase la configuración de la Fig. 1.6(a)). En este caso particular, todos los acoplamientos pueden tomarse reales y nuestro modelo se reduce al conocido modelo de Anderson para espín 1/2 con un nivel [Anderson, 1961]. Este modelo fue propuesto por Anderson para entender el efecto de las impurezas magnéticas en metales. De hecho, como se muestra en la Fig. 1.6(b), cuando la energía del doblete E_d está muy por debajo del nivel de Fermi, el estado localizado está siempre ocupado a bajas temperaturas. Puede ser ocupado con un electrón con espín para arriba o con un electrón con espín para abajo. En el caso de impurezas magnéticas los orbitales están muy localizados y la repulsión de Coulomb es grande. Esto implica que sólo hay un electrón por vez en la impureza que sigue siendo magnética. En nuestro modelo este también es el caso, es como un momento magnético 1/2 rodeado de un mar de electrones de conducción. Ya que el doblete se hibrida con las bandas de conducción, hay procesos en los que un electrón que ocupa el doblete tunelea a la banda de conducción y otro electrón de conducción salta de nuevo a ocupar el hueco dejado. Estos procesos pueden ser acompañados con inversión del espín. Como mostró

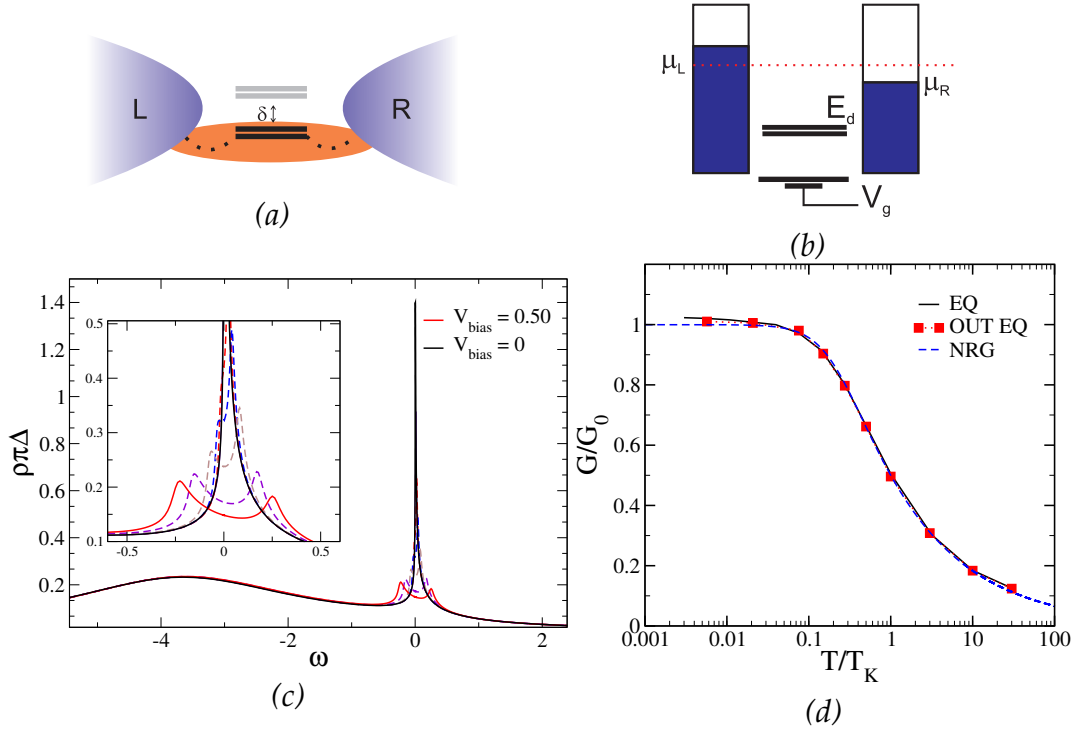


Figura 1.6: (a) Esquema del modelo de interferencia cuando sólo hay un doblete. Este se reduce al modelo Anderson de un nivel. (b) La energía E_d del doblete está muy por debajo del nivel de Fermi ϵ_F de los electrones de conducción en los cables a la izquierda y derecha. (c) Densidad de estados del nivel localizado a bajas temperaturas como función de la energía calculada en equilibrio (curva negra) y para varios voltajes (curvas de trazos) hasta $V_{bias} = 0.5$ (curva roja). Hay un pico centrado en $\omega = E_d = -4$ que corresponde al pico de transferencia de carga. El ancho de este pico está dado por la hibridación con las bandas de conducción. Este es el origen del tiempo de vida finito de un electrón en el nivel localizado. Este ancho, en la ausencia de interacciones, se denomina ancho del nivel resonante $\Delta = 1$ y es nuestra unidad de energía. Hay otro pico cerca de $\omega = \epsilon_F = 0$. Esta es la resonancia Kondo. La ancho de este pico está relacionado con la temperatura de Kondo T_K que es la escala relevante en el régimen de Kondo. La resonancia se divide fuera de equilibrio. (d) La conductancia en unidades de $G_0 = 2e^2/h$ como función de la temperatura escalada por T_K . La línea negra continua corresponde al resultado obtenido en respuesta lineal mientras que los cuadrados rojos corresponden al cálculo fuera de equilibrio. Nuestros resultados están de acuerdo con el grupo de renormalización numérica (línea de trazos) en varias décadas de temperatura.

Jun Kondo [Kondo, 1964], estos son los procesos relevantes que conducen a un comportamiento diferente a bajas temperaturas. Por debajo de una cierta temperatura característica, la temperatura de Kondo T_K , el magnetismo es apantallado por la formación de un estado de muchos cuerpos singlete que entrelaza a los electrones localizados y los electrones de conducción. Este es el efecto Kondo [Hewson, 1997]. Como se muestra en la Fig. 1.6(c), una de las firmas del desarrollo del efecto Kondo es un incremento de la

densidad de estados de la impureza a bajas temperaturas cerca del nivel de Fermi $\epsilon_F = 0$ [Tosi et al., 2012b]. Se puede observar en la figura que hay dos picos en la densidad de estados del nivel localizado. Hay un pico situado en $\omega = E_d = -4$ que corresponde al pico de transferencia de carga. Sería la única contribución esperada a altas temperaturas. El ancho del pico está relacionado con la hibridación con la banda de conducción, en ausencia de interacciones se llama ancho del nivel resonante Δ , que tomamos como nuestra unidad de energía $\Delta = 1$. El otro pico, que está más cerca de la energía de Fermi $\epsilon_F = 0$ es la resonancia Kondo, cuya ancho está relacionado con T_K . Se puede observar que la resonancia se divide a voltaje finito. En la Fig. 1.6(d) la conductancia en unidades de $G_0 = 2\frac{e^2}{h}$ se muestra como función de la temperatura. La línea de color negro corresponde a un cálculo en respuesta lineal y los cuadrados rojos son el resultado del cálculo de no-equilibrio obtenido de la conductancia diferencial dI/dV en $V_{bias} = 0$.⁵ Los resultados se encuentran en muy buen acuerdo con los del grupo de renormalización numérica (línea discontinua) en varias décadas de temperatura [Tosi et al., 2012b].

Empezamos la caracterización de nuestro modelo con el estudio de las propiedades de transporte en el límite de un solo doblete de espín conectado a izquierda y derecha. Nuestro modelo se reduce al modelo Anderson de espín 1/2 que tiene simetría SU(2), es decir, la simetría de rotación completa de un espín 1/2. Este problema ha sido muy bien estudiado y es posible comparar nuestros resultados de la física Kondo con otras técnicas robustas como NRG o los resultados exactos de Bethe-Ansatz. Además han habido numerosas realizaciones experimentales del efecto Kondo en muchos sistemas diferentes como puntos cuánticos semiconductores [Goldhaber-Gordon et al., 1998b] [Goldhaber-Gordon et al., 1998a] [Cronenwett et al., 1998] [van der Wiel et al., 2000], nanotubos de carbono [Nygård et al., 2000] e incluso moléculas [Park et al., 2002] [Liang et al., 2002] dando pruebas de su universalidad. El estudio de este límite nos permitió probar las predicciones sobre las propiedades de transporte en el régimen de Kondo [Ng and Lee, 1988] [Glazman and Raikh, 1988] [Meir et al., 1993].

El límite de simetría SU(4)

Cuando ambos dobletes juegan un papel, una rica variedad de regímenes se puede explorar con el modelo. En el caso particular en que ambos dobletes tienen la misma energía $E_1 = E_2$ (ver Fig. 1.7(a)), una simetría más alta se puede obtener si todos los acoplamientos son iguales en amplitud $|V_L^1| = |V_L^2| = |V_R^1| = |V_R^2| = V$. La primera condición hace que los cuatro estados $|i\sigma\rangle$ estén degenerados. En el caso de $\phi = \pi$, utilizando la segunda condición es posible formar una combinación lineal de los dobletes para mostrar que el Hamiltoniano del modelo tiene simetría SU(4). En el contexto de nuestro modelo de interferencia, la realización del efecto Kondo SU(4)

⁵Se obtiene la conductancia diferencial mediante una diferenciación numérica de la corriente con respecto al voltaje aplicado.

es muy interesante porque el estado de muchos cuerpos formado por debajo de T_K entrelaza los electrones localizados y de conducción en los grados de libertad orbitales y de espín. Como consecuencia de esto las propiedades de transporte son distintivas en este régimen [Roura-Bas et al., 2011]. Por otra parte, ha habido una gran cantidad de estudios teóricos sobre las propiedades de transporte que deberían observarse en el caso SU(4) [Borda et al., 2003] y varias realizaciones experimentales [Tettamanzi et al., 2012] [Jarillo-Herrero et al., 2005] que se puede analizar.

Como resultado de la degeneración adicional no sólo procesos de inversión del espín, sino también procesos de inversión orbital son posibles. Esto conduce a un aumento de la temperatura de Kondo en varios órdenes de magnitud. La densidad de estados correspondiente al doblete con la energía E_1 (llamado doblete 1) se muestra en la Fig. 1.7(c) en el límite de simetría SU(4). Se puede observar que la resonancia Kondo es más ancha que en el caso SU(2) y el máximo se desplaza hacia energías positivas. Lo primero es un reflejo de una mayor T_K y lo último es debido al hecho de que la ocupación total, que es casi uno en el régimen de Kondo, es igualmente compartida por los cuatro estados $|i\sigma\rangle$ conduciendo a una ocupación parcial cerca de $\langle n_{i\sigma} \rangle \sim 0.25$ [Tosi et al., 2012a]. En acuerdo con esta ocupación, la regla de suma de Friedel impone el valor de la densidad de estados en el nivel de Fermi en un valor más bajo que en el caso SU(2).

De SU(4) a SU(2)

La simetría SU(4) es difícil de realizar experimentalmente. Por ejemplo, si las energías de los dobletes son ligeramente diferentes, la degeneración completa de cuatro se pierde; o si los acoplamientos no son los mismos. La simetría SU(4) se pierde también en nuestro modelo si la fase no es π . Como veremos, es interesante estudiar el efecto de un campo que rompe la simetría en las propiedades del modelo. Introducimos un desdoblamiento $\delta = E_2 - E_1$ (véase la Fig. 1.7(b)), que permite explorar el *cross-over* entre los dos dobletes degenerados con simetría SU(4) para $\delta = 0$ y un doblete con simetría SU(2) en el límite de $\delta \rightarrow \infty$ [Tosi et al., 2012a]. En el **Capítulo 6** nuestros resultados sobre el efecto de la ruptura de simetría con el campo δ se discuten en equilibrio. Como se muestra en la Fig. 1.7(d), la densidad de estados de los dobletes ρ_1 (línea de color negro) y ρ_2 (línea discontinua roja) cambia drásticamente con δ . A medida que δ aumenta, la ancha resonancia Kondo en ρ_1 se convierte en un pico Kondo estrecho centrado en $\omega \sim 0$ correspondiente a la degeneración espín restante. El modelo se reduce a un modelo de Anderson de un nivel con simetría SU(2) para $\delta \rightarrow \infty$. No hay vestigio de la resonancia Kondo en ρ_2 a temperaturas bajas. Para δ finito también aparecen picos satélite. En ρ_1 hay un pico en $\omega = -\delta$ y en ρ_2 un pico satélite aparece en $\omega = +\delta$. Estos picos, como la resonancia Kondo, también son producidos por correlaciones.

Es muy útil seguir la evolución de la temperatura de Kondo con δ . El valor de $T_K(\delta)$ puede ser extraído de la mitad de la ancho a mitad del má-

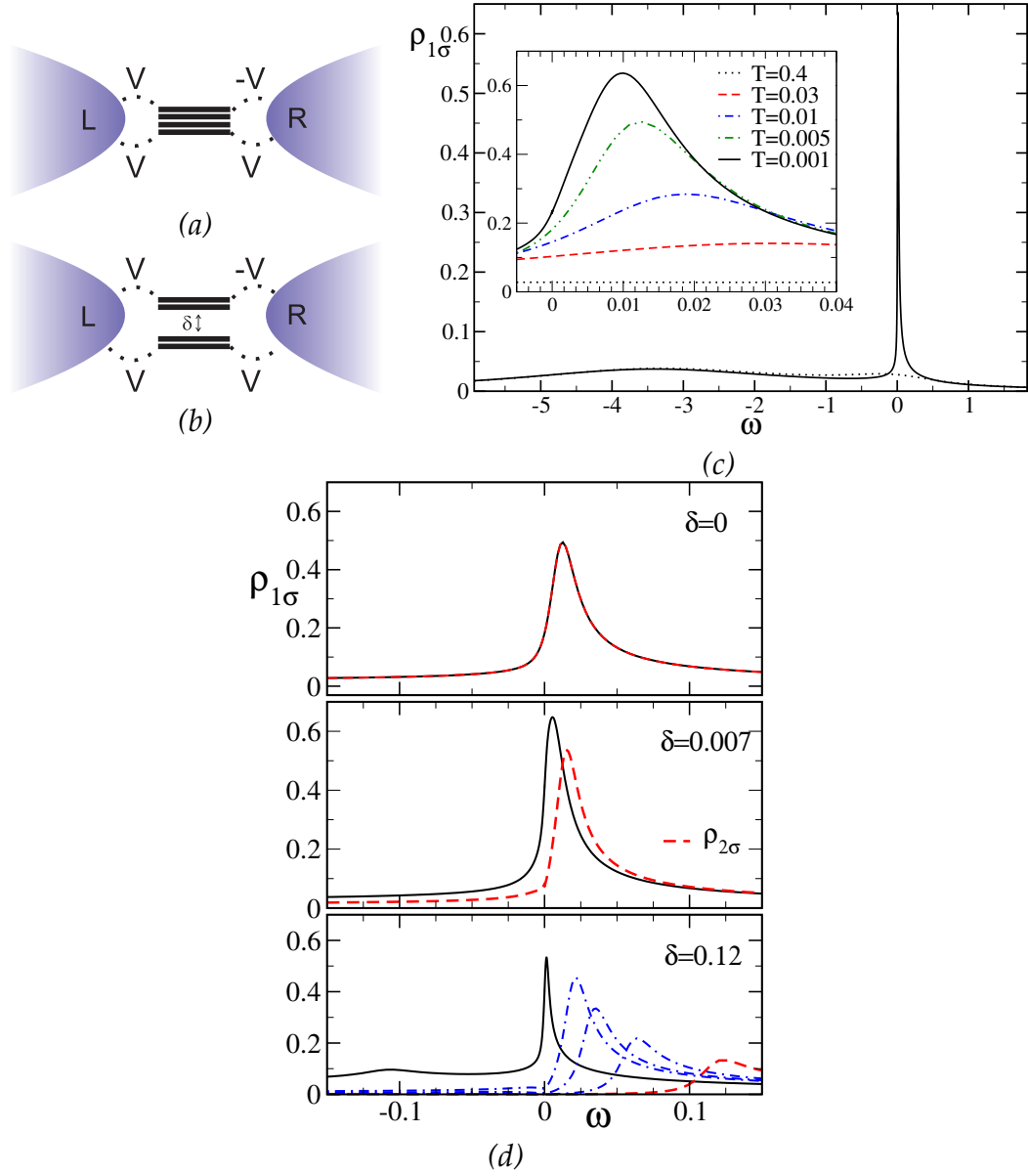


Figura 1.7: Esquema de nuestro modelo de interferencia (a) en una condición de alta simetría y $\phi = \pi$, y (b) bajo el efecto de un campo de ruptura de simetría que produce un desdoblamiento de energía $\delta = E_2 - E_1$. (c) Densidad de los estados correspondiente al doblete de energía E_1 (llamado doblete 1) en el límite de simetría SU(4). La evolución con la temperatura se muestra en el recuadro interior. Además del pico de transferencia de carga ubicado en $\omega = E_1 = -4$ hay un pico cerca de $\omega = 0$ que corresponde a la resonancia Kondo. En este límite de mayor simetría la degeneración es cuatro (dos dobletes de espín degenerados) en lugar de solamente dos como en el caso SU(2) de un nivel. Hay más procesos virtuales que contribuyen al efecto Kondo en este límite de simetría SU(4) respecto al SU(2). El ancho de la resonancia, relacionada con la temperatura de Kondo T_K es órdenes de magnitud más grande. Además, el máximo del pico se desplaza a la derecha. (d) Evolución de la densidad de estados de los niveles localizados con δ . La línea continua negra (línea discontinua roja) corresponde a $\rho_{1\sigma}$ ($\rho_{2\sigma}$). A medida que δ aumenta las densidades de estado se tornan muy diferentes. En $\rho_{1\sigma}$ hay una resonancia Kondo estrecha debido a la degeneración de espín y también un pico satélite en $\omega = -\delta$. En $\rho_{2\sigma}$, para δ suficientemente grande, sólo hay un pico ubicado en $\omega = +\delta$. En el último panel, las curvas de líneas azules discontinuas corresponden a valores intermedios de δ .

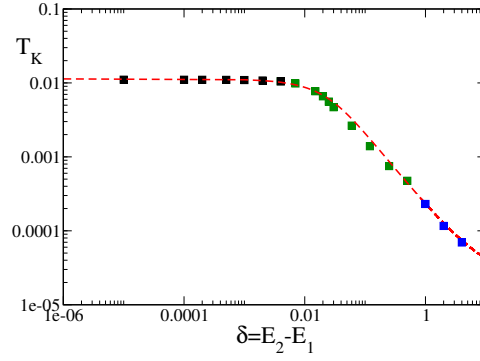


Figura 1.8: Evolución de la temperatura de Kondo T_K con la ruptura de simetría generada por el campo δ . La línea discontinua corresponde a una expresión analítica que obtuvimos mediante un cálculo variacional. Los cuadrados corresponden a los valores tomados del ancho mitad a la mitad del máximo del pico de Kondo cerca de $\omega \sim 0$ en ρ_1 .

ximo (HWHM) del pico Kondo cerca de $\omega \sim 0$ en la densidad de estados del doblete 1, que tiene una energía fija. Esto se muestra en la Fig. 1.8. Para $\delta = 0$ el Hamiltoniano tiene simetría $SU(4)$. Las densidades de estados para los dobletes son las mismas y el ancho que da la temperatura de Kondo $T_K(SU(4))$ es grande. Mientras $\delta < T_K(SU(4))$ las densidades de estado no se modifican fuertemente aunque la simetría ya está rota. Un comportamiento similar se observa en el caso de un doblete en presencia de un campo magnético que rompe la degeneración de espín [Costi, 2000] [Aligia and Salguero, 2004]. Cuando $\delta > T_K(SU(4))$, la temperatura de Kondo disminuye órdenes de magnitud como debe de ser para alcanzar $T_K(SU(2))$ en el límite de gran desdoblamiento. La línea a trazos en la figura corresponde a una expresión analítica que obtuvimos mediante un cálculo variacional. Nuestra expresión interpola entre ambos límites ($SU(4) \rightarrow$ un nivel con $SU(2)$) y está en buen acuerdo con los valores extraídos de HWHM de la resonancia Kondo en la densidad de estados [Tosi et al., 2012a].

Aparte de las propiedades eléctricas, en la perspectiva de nuevos dispositivos ha habido un creciente interés en la comprensión de la transferencia de calor en sistemas nanoscópicos. El calentamiento es perjudicial para cualquier dispositivo que busque ser útil. Una de las soluciones propuestas es utilizar el efecto Seebeck para convertir una diferencia de temperatura en un voltaje. Para este propósito, hay una búsqueda actual de materiales con gran poder termoeléctrico (o coeficiente Seebeck). En los sistemas nanoscópicos, el poder termoeléctrico está relacionado aproximadamente a la derivada de la densidad de estados en el nivel de Fermi [Costi, 2010]. Hemos observado que el máximo de la densidad de estados en el $SU(4)$ se desplaza hacia la derecha (ver Fig. 1.7(c)), la pendiente en el nivel de Fermi es grande, resultando en un incremento del poder termoeléctrico. Hemos estudiado las propiedades termoeléctricas en el *cross-over* $SU(4) \rightarrow SU(2)$ [Roura-Bas et al., 2012b] aunque estos resultados no forman parte de esta tesis.

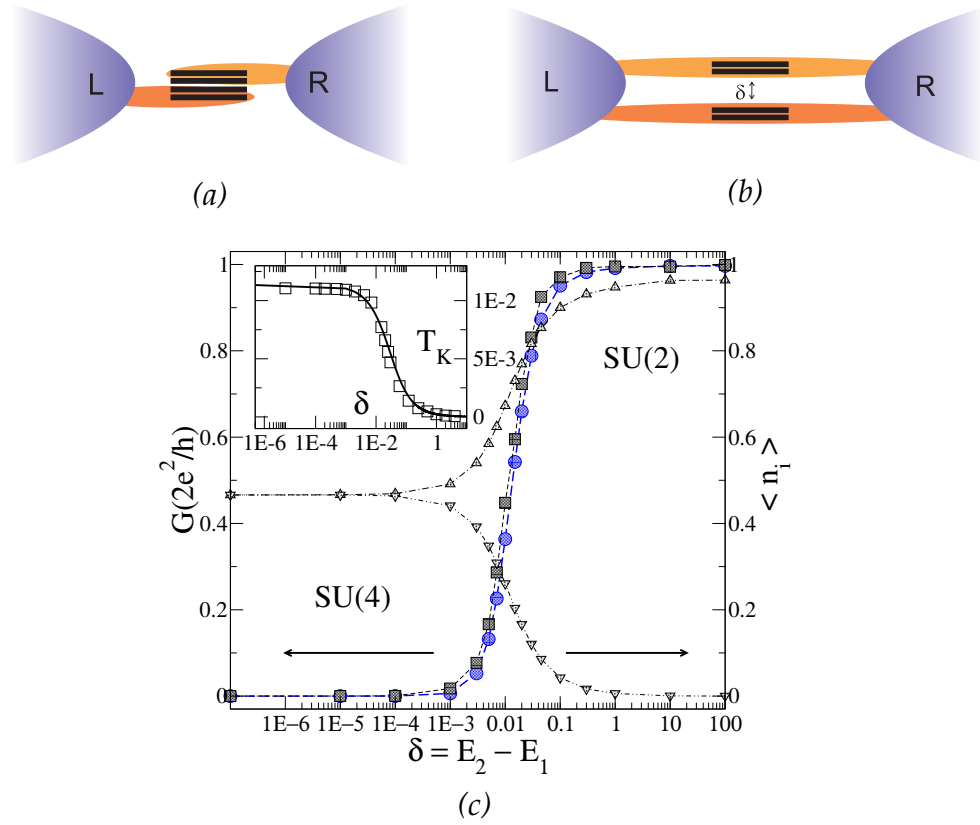


Figura 1.9: Esquema de nuestro modelo de interferencia con respecto a las propiedades de transporte para $\phi = \pi$ y para acoplamientos iguales (a) con $E_2 = E_1$ y (b) bajo el efecto de un campo de ruptura de simetría que produce un desdoblamiento $\delta = E_2 - E_1$. (c) Conductancia (eje izquierdo), ocupaciones $\langle n_i \rangle$ (eje derecho) y temperatura de Kondo T_K (recuadro interior) como una función de δ .

Interrelación entre la interferencia cuántica y el efecto Kondo en las propiedades de transporte

En la condición de $\delta = 0$ el Hamiltoniano de nuestro modelo tiene simetría SU(4). Sin embargo, con respecto a las propiedades de transporte es muy diferente de un modelo de Anderson SU(4). De acuerdo con este modelo cada uno de los estados degenerados $|i\sigma\rangle$ está acoplado a su propio par de cables de fuente y sumidero. Como se muestra en la Fig. 1.9(a), en nuestro modelo este no es el caso ya que el SU(4) se puede encontrar haciendo una combinación lineal de los dobletes $|1\sigma\rangle \pm |2\sigma\rangle$ que se acoplan a la izquierda y a la derecha de una manera especial. De hecho, en el límite de simetría SU(4) los cables están desconectados de manera efectiva. Las propiedades de transporte obtenidas con nuestro modelo se discuten en el **Capítulo 7**. El principal resultado se condensa en la Fig. 1.9(c) que muestra la evolución de la conductancia (eje de la izquierda) y las ocupaciones (eje de la derecha) con δ [Roura-Bas et al., 2011].

En el límite de $\delta = 0$, los dobletes están degenerados y nuestro modelo tiene simetría $SU(4)$. En este caso de fase π , la conductancia es cero debido al efecto de la interferencia total destructiva. Por otra parte, la conductancia está fuertemente suprimida mientras $\delta < T_K^{SU(4)}$ y las ocupaciones son casi las mismas para ambos dobletes. Cuando $\delta \sim T_K(SU(4))$ la conductancia comienza a aumentar y las ocupaciones se separan. Como se muestra en la Fig. 1.9(b), para δ finito nuestro modelo se reduce a un Anderson $SU(4)$ con un campo de ruptura de simetría. En el límite de δ infinito, se recupera un modelo $SU(2)$ de un solo nivel. Tan pronto como las ocupaciones de los dobletes son diferentes, se pierde el efecto de la interferencia destructiva. La conductancia aumenta hasta el límite unitario, $2e^2/h$, mientras que $\langle n_1 \rangle \rightarrow 1$ y $\langle n_2 \rangle \rightarrow 0$. Hay características muy interesantes que se pueden observar en este *cross-over* causadas por la interrelación entre las correlaciones electrón-electrón y la interferencia cuántica en el régimen de Kondo. Entre ellas, para δ finito aparecen picos inelásticos en la conductancia diferencial a voltaje $V_{bias} = 2\delta$ que corresponden a los picos satélites observados en las densidades de estados. La presencia de picos satélite en la dI/dV ha sido observada experimentalmente por Tettamanzi *et al.* en el *cross-over* de simetría $SU(4)$ a $SU(2)$ por la aplicación de un campo magnético (es decir, desde degeneración orbital y de espín a sólo orbital) [Tettamanzi et al., 2012].

La molécula de benceno

El transporte a través de moléculas ha sido un área de investigación muy activa en los últimos 20 años [Cuevas and Scheer, 2010]. Después de los primeros experimentos con moléculas para formar junturas moleculares [Reed et al., 1997], los avances han implicado tanto a la teoría como a los experimentos. En el aspecto teórico, se hizo evidente la necesidad de cálculos confiables de la estructura electrónica molecular en presencia de los electrodos metálicos para complementar la mediciones [Nitzan and Ratner, 2003]. En el lado experimental, diferentes técnicas se han empleado (por ejemplo, juntura por rotura controlada mecánicamente, electromigración, fabricación de nanogaps, realización de contacto por AFM y STM utilizando puntas conductoras) para poner en contacto las moléculas con electrodos de una manera controlada y para alcanzar configuraciones de una sola molécula [Tao, 2006]. Por otra parte, con el fin de construir un transistor molecular es necesario disponer de una perilla adicional en las junturas que actúe como compuerta. Ha habido una gran cantidad de desafíos para mejorar la fabricación de dispositivos y las ideas hoy en día van más allá de las propiedades de transporte para tomar ventaja también de las propiedades mecánicas, ópticas y térmicas [Aradhya and Venkataraman, 2013]. En particular, se ha reportado recientemente en monocapas auto-ensambladas [Guédon et al., 2012] y también en junturas moleculares [Ballmann et al., 2012] la presencia de efectos de interferencia en el transporte en moléculas. Más aún, un estudio de la ley de superposición de Kirchhoff para circuitos electrónicos se ha realizado en moléculas utilizando dos columnas vertebrales idénticas

paralelas y demostró fallar dramáticamente debido a la interferencia cuántica constructiva [Vazquez et al., 2012]. Estos hallazgos notables destacan la naturaleza ondulatoria de los portadores de carga en las moléculas y la coherencia de fase de estos dispositivos [Nichols and Higgins, 2012]. Teniendo esto en mente, hay una vieja propuesta de Cardamone *et al* [Cardamone et al., 2006] [Stafford et al., 2007] para construir un QuIET (Quantum Interference Effect Transistor o transistor de efecto de interferencia cuántica) aprovechando la simetría de los orbitales moleculares y la geometría de las conexiones en dispositivos basados en anulenos. Nuestro modelo de interferencia también se inspira en estas ideas y considera además el carácter localizado de estos estados que han demostrado que la interacción de Coulomb puede ser importante [Park et al., 2002] [Liang et al., 2002] [Kubatin et al., 2003] [Roch et al., 2008] [Parks et al., 2010]. Aunque todavía no existe un control total de las conexiones y la compuerta, la ciencia está avanzando muy rápidamente!

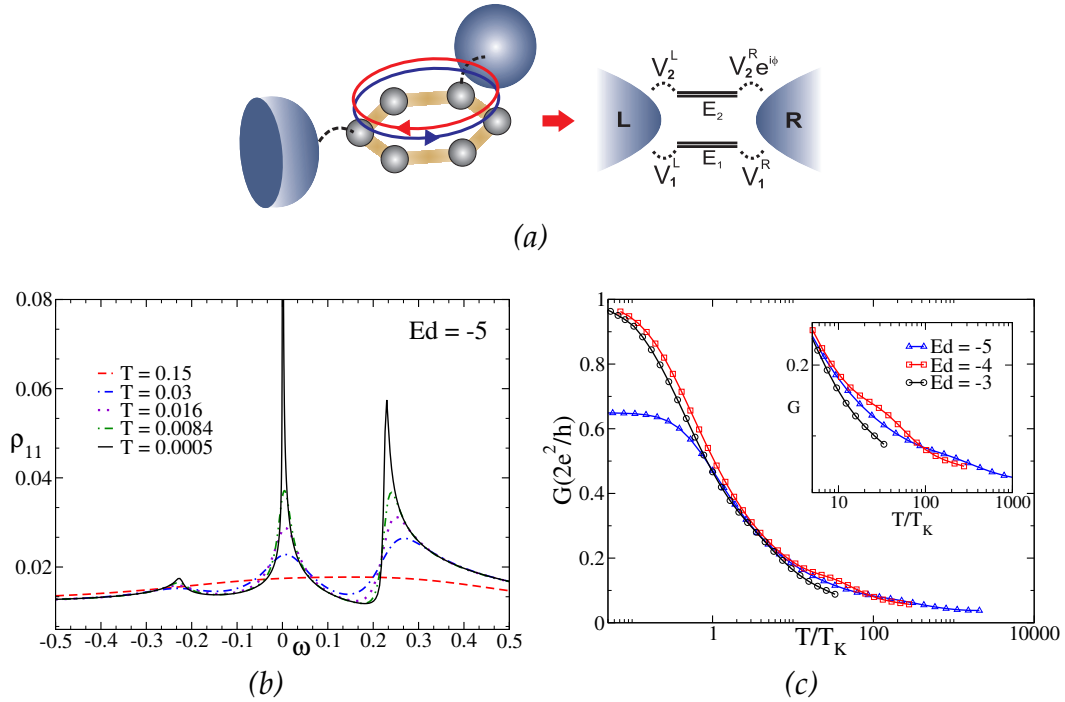


Figura 1.10: (a) Esquema del problema de transporte a través de una molécula de benceno modelado con el modelo de Aligia. Hay dos estados de muchos cuerpos con la simetría de la molécula (representados por las flechas azules y rojas que apuntan en direcciones opuestas) muy cerca en energía (eventualmente degenerados por simetría de inversión). En función de la geometría de la conexión, es posible tener una diferencia de fase ϕ en transporte a través de estos estados. (b) La densidad de estados para el nivel localizado, cuatro veces degenerado, considerando $E_1 = E_2 = E_d = -5$, iguales acoplamientos y fase $\phi = 2\pi/3$. Hay un pico cerca del nivel de Fermi que corresponde a la resonancia Kondo y dos picos satélite. La evolución con la temperatura muestra que los tres picos son causados por correlaciones. (c) Conductancia como función de la temperatura calculada para $E_d = -3, -4, -5$.

Hemos aplicado nuestro modelo para estudiar las propiedades de transporte de una molécula de benceno [Roura-Bas et al., 2012a]. Los resultados se discuten en el **Capítulo 8**. La Fig. 1.10(a) es una representación esquemática de la molécula conectada a la fuente y el sumidero en una de las configuraciones posibles (posición *meta*). Hay dos estados de muchos cuerpos relevantes representados con flechas azul y roja que apuntan en direcciones opuestas. Estos estados pueden ser etiquetados según su simetría con un vector de onda $|\pm K\rangle$ y pueden estar degenerados. Dependiendo de la geometría de la conexión es posible tener una diferencia de fase en el transporte a través de estos estados. Hemos mapeado este problema en nuestro modelo de interferencia y considerado $E_1 = E_2$, y acoplamientos iguales $|V_L^1| = |V_L^2| = |V_R^2| = |V_R^1| = V$. Hemos tomado $\phi = 2\pi/3$ que corresponde al caso representado en la Fig. 1.10(a).

Las propiedades de transporte muestran un efecto de interferencia destructiva parcial. Aunque los dobletes están degenerados y los acoplamientos son los mismos, la fase produce un efecto no trivial. Como se puede observar en la Fig. 1.10(b), la densidad de estados ρ_1 del doblete con energía E_1 tiene tres picos. Uno de los picos se encuentra en el nivel de Fermi $\omega \sim 0$ y corresponde a la resonancia Kondo. Los otros dos picos están situados simétricamente en $\pm\tilde{\delta}$. De hecho, la fase $\phi = 2\pi/3$ introduce una mezcla entre los dobletes a través de los electrones de conducción produciendo un desdoblamiento efectivo $\tilde{\delta}$. Los picos satélite son análogos a los que aparecen cuando la simetría SU(4) se rompe por la acción de un campo de ruptura de simetría $\delta = \tilde{\delta}$ [Roura-Bas et al., 2011]. Una diferencia importante es que hay peso de ambos picos satélite en las densidades de estados de los dos dobletes. Los picos satélite se observan también en la conductancia diferencial y deberían estar presentes en un experimento. La separación efectiva varía aproximadamente como $\sim V^2/E_d$ a medida que se mueve la energía del nivel localizado. En la Fig. 1.10(c) la conductancia se muestra como función de la temperatura escalada con T_K para tres valores de E_d . En la medida en que E_d aumenta, el desdoblamiento efectivo se reduce y como consecuencia hay más interferencia destructiva: la conductancia satura a un valor inferior. Para $E_d = -4$ es posible observar una protuberancia cerca de $T/T_K \approx 20$ que corresponde al desdoblamiento efectivo. Recuperamos en nuestro cálculo algunas características de energía finita que no pueden ser detectados por otras técnicas o si el cálculo no se realiza fuera de equilibrio.

Parte II: Espectroscopía orbital del efecto Kondo

Los grados de libertad orbitales son esenciales para la descripción de los fenómenos de interferencia. En nuestro modelo efectivo se tienen en cuenta con la inclusión de dos dobletes. Recientemente, hubo una propuesta experimental realizada por el grupo de Godhaber-Gordon [Amasha et al., 2013] para utilizar los grados de libertad orbitales en un sistema de dos puntos cuánticos (DQD) como un pseudo-espín para llevar a cabo la espectroscopía.

pía de la función de onda cuando el efecto Kondo se desarrolla. A los fines de entender la idea, es mejor analizar primero el caso de un doblete hibridado a un par de cables de fuente-sumidero. El nivel localizado tiene una energía $E_d - E_F$ con respecto al nivel de Fermi E_F y el acoplamiento total de los cables es $\Gamma = \Gamma_S + \Gamma_D$, donde Γ_ν es la matriz de hibridación. Es más común referir las energías al ancho del nivel resonante $\Delta = \Gamma/2$ que da el ancho del pico de transferencia de carga en la densidad de estados en ausencia de interacciones. El costo de energía por tener dos electrones en el nivel debido a la repulsión de Coulomb es U . Cuando el sistema está en el régimen de Kondo, es decir, $E_d - E_F \ll \Delta$ y $E_d + U - E_F \gg \Delta$, la ocupación media del nivel a bajas temperaturas es cercana a uno. El estado está degenerado y puede ser ocupado con un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo. Hay procesos virtuales en los que un electrón con espín hacia arriba, por ejemplo, salta a la banda de conducción y luego otro electrón desde la izquierda ocupa el agujero dejado. Puede suceder que este electrón tenga un espín diferente, resultando en una inversión del espín. Estos procesos de inversión de espín son los responsables de la formación del estado Kondo a bajas temperaturas. En este estado los electrones localizados y de conducción se entrelazan formando un singlete. Esta función de onda Kondo se forma debajo de la temperatura de Kondo T_K , en la que las correlaciones electrón-electrón se vuelven dominantes. Se plantea la cuestión de si es posible probar la estructura de esta función de onda de muchos cuerpos. En un experimento pensado, sería necesario contar con cables resueltos en espín. Si el potencial químico de los electrones de conducción con espín hacia arriba y hacia abajo se pudiese variar de forma independiente, sería posible analizar sus contribuciones por separado. En particular, si se aplica un campo magnético, la degeneración de espín se rompe y el efecto Kondo se muere tan pronto como el desdoblamiento Zeeman es mayor que la temperatura de Kondo. En principio, sería interesante estudiar la evolución de los pesos de cada componente de espín a medida que se destruye el efecto Kondo.

Un esquema de la propuesta por Amasha *et al.* se presenta en la Fig. 1.11(a) [Amasha et al., 2013]. La idea es usar dos puntos cuánticos mutuamente interactuantes (mediante un acoplamiento capacitivo) conectados cada uno a un par de cables de fuente-sumidero. En presencia de repulsión de Coulomb mutua, el número de electrones en los puntos cuánticos (N_1, N_2) no se puede variar de forma independiente. Dado que los puntos cuánticos son interactuantes la cantidad bien definida (para el sistema aislado) es el número total de electrones $N = N_1 + N_2$. En lugar de tener forma de tablero de ajedrez, el diagrama de estabilidad de (N_1, N_2) en función de las energías de los niveles localizados en cada punto E_1, E_2 tiene forma de panal de abeja, con hexágonos de (N_1, N_2) estables [van der Wiel et al., 2003]. En la Fig. 1.11(b) una parte de interés del diagrama de estabilidad se muestra en el caso en que la repulsión mutua U_{12} y la repulsión en cada punto cuántico U_i son muy grandes. Hay una línea de coexistencia en la que las configuraciones $(1, 0) \leftrightarrow (0, 1)$ son equivalentes. Esto significa que desde el punto de

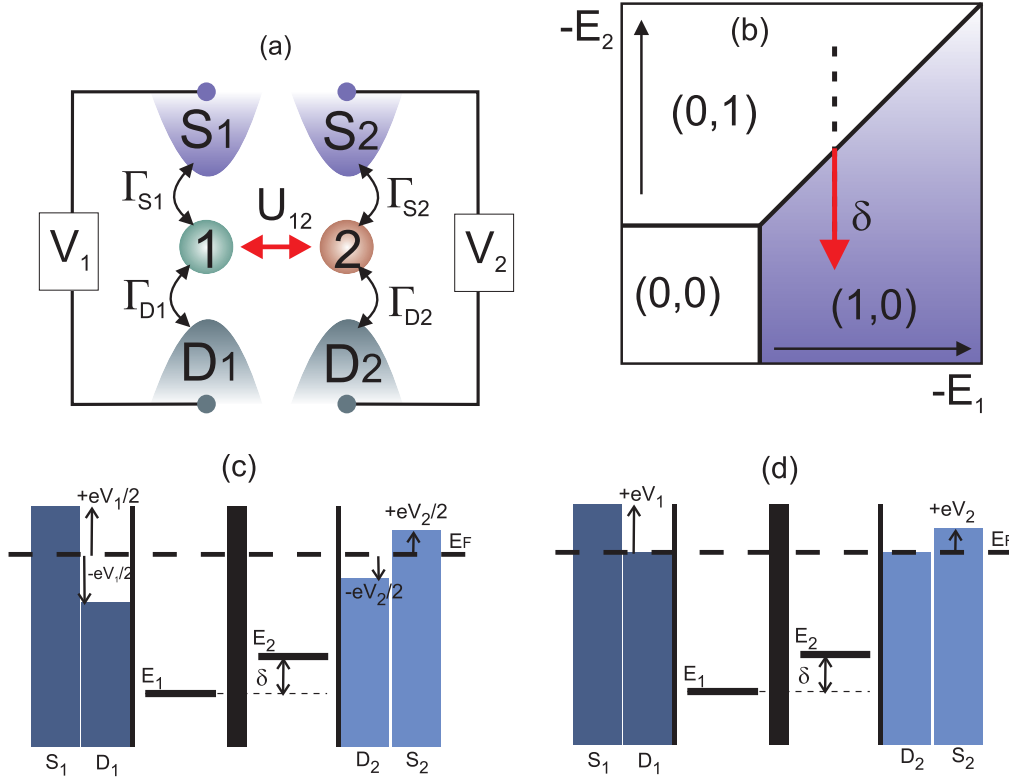


Figura 1.11: (a) Esquema del experimento del sistema de dos puntos cuánticos. Hay dos puntos cuánticos capacitivamente acoplados cada uno conectado a un par de cables fuente-sumidero. El acoplamiento de los puntos con los cables es $\Gamma_{\nu i}$, con $\nu = S, D$ e $i = 1, 2$. El acoplamiento total $\Gamma_i = \Gamma_{S_i} + \Gamma_{D_i}$ es nuestra unidad de energía. El voltaje aplicado al punto cuántico i es V_i . La interacción repulsiva entre ellos es U_{12} . Consideramos que esta repulsión es muy grande, así como la repulsión de Coulomb en cada punto U_i . (b) Diagrama de estabilidad que muestra las ocupaciones estables (N_1, N_2) en función de las energías de los niveles localizados E_1 y E_2 . En el límite en que resolvemos el problema, la energía de tener dos electrones en el sistema es muy grande, estrictamente infinita. Es suficiente considerar el régimen en el que las dos posibles configuraciones $(1, 0) \leftrightarrow (0, 1)$ son equivalentes. En este caso, $E_1 = E_2$ y el grado de libertad orbital se comporta como un pseudo-espín. En suma a la degeneración de espín, esto conduce a un nivel localizado con degeneración cuatro. Si $\Gamma_1 = \Gamma_2$, el Hamiltoniano tiene simetría $SU(4)$. La degeneración orbital puede ser rota de-sintonizando las energías relativas de los niveles localizados. Esto puede ser pensado como un desdoblamiento pseudo-Zeeman $\delta = E_2 - E_1$. (c) Esquema de los niveles de energía de los estados localizados con respecto al nivel de Fermi (que se toma como cero) de los cables (azul oscuro para S_1 - D_1 y azul claro para S_2 - D_2). Trabajamos en el régimen de Kondo. Cuando se aplica el voltaje, la caída puede ser simétrica $\mu_{S_i(D_i)} = +(-)V_i/2$ o (d) asimétrica, $\mu_{S_i} = +V_i$, $\mu_{D_i} = 0$.

vista de la energía, es lo mismo tener un electrón en QD1 o en QD2. Este grado de libertad orbital hace el papel de un pseudo-espín i . Además de la degeneración de espín, a lo largo de la línea de coexistencia los cuatro estados $|i\sigma\rangle$ están degenerados. En esta condición, si las hibridaciones totales son las mismas $\Gamma_1 = \Gamma_2$ el sistema se puede modelar con un modelo de An-

derson SU(4). La repulsión de Coulomb prohíbe tener más de un electrón y el nivel se mantiene “magnético”. En el régimen de Kondo, hay procesos virtuales que involucran a los electrones de conducción que pueden estar acompañados de una inversión del espín o del pseudo-espín. Estos procesos conducen a un efecto Kondo más robusto con respecto al caso SU(2), con una temperatura de Kondo más grande. La función de onda a bajas temperaturas entrelaza los electrones localizados y de conducción en espín y pseudo-espín. Este es un efecto Kondo con simetría SU(4) (o el efecto Kondo SU(4) como también voy a llamarlo). Estas correlaciones orbitales y de espín conducen a propiedades de transporte muy interesantes [Borda et al., 2003]. Ha habido diferentes realizaciones experimentales de un sistema de dos puntos cuánticos acoplados capacitivamente [Wilhelm et al., 2002] [Pohjola et al., 2001] [Holleitner et al., 2002] [Hübel et al., 2008] [Okazaki et al., 2011] destacando el papel de las correlaciones orbitales. La ventaja de la degeneración orbital adicional es que, dado que los puntos cuánticos están acoplados a reservorios independientes, las sondas de pseudo-espín están disponibles y la contribución de cada QD puede medirse por separado. Esta es la propuesta para hacer la espectroscopía del efecto Kondo orbital de Amasha *et al.* Como se muestra en la Fig. 1.11(b), las energías relativas de los niveles en los puntos cuánticos se pueden ajustar (flecha roja) para romper la degeneración orbital. Esto es como un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ . La evolución de las contribuciones orbitales también puede ser analizada en función de δ .

Me interesé mucho en el problema cuando leí el artículo. Habíamos estado estudiando el efecto Kondo SU(4) y la transición a un efecto Kondo SU(2) de un solo nivel en el contexto de nuestro modelo de interferencia. Esta realización experimental fue alentadora. Modifiqué nuestro modelo para incluir dos pares de cables de fuente y sumidero, y la posibilidad de tener cuatro potenciales químicos diferentes (detalles en el **Apéndice D**). En la Fig. 1.11(c) y (d) se muestra un esquema de la posición de las energías E_1 y E_2 con respecto a los niveles de Fermi de los reservorios y la forma en que se aplica el voltaje. Realizamos un cálculo completo fuera de equilibrio en este complicado problema interactuante y pudimos llegar a un acuerdo cualitativo con el experimento [Tosi et al., 2013]. Presentamos una discusión de un punto que creemos no está claro en el experimento con respecto a las condiciones para la espectroscopía. Estos resultados se discuten en el **Capítulo 9**.

Los principales resultados se muestran en las Figs. 1.12 y 1.13. Los mapas de color muestran la conductancia diferencial $G_i = dI_i/dV_i$ de QDi como función de V_1 y V_2 . Cuando el sistema está totalmente degenerado $E_1 = E_2$ ($\delta = 0$), $G_1 = G_2$ y los mapas son los mismos intercambiando los ejes ($V_1 \leftrightarrow V_2$). El mapa de la Fig. 1.12 corresponde a este caso de simetría SU(4). Hay un aumento de la conductancia cerca de $V_1, V_2 \sim 0$ debido al desarrollo del efecto Kondo. La conductancia cae abruptamente para $V_1, V_2 \neq 0$ (el ancho del pico en las dI/dV es del orden de la temperatura de Kondo). Sin embargo, un aumento de la conductancia se puede observar en la línea de

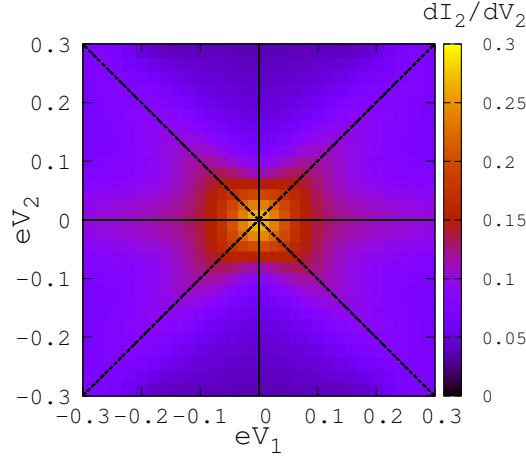


Figura 1.12: Conductancia diferencial $G_2 = dI_2/dV_2$ de QD2 como una función de las tensiones de V_1 , V_2 en el caso de simetría $SU(4)$. Hay un aumento de la conductancia para $V_1, V_2 \sim 0$ como consecuencia del efecto Kondo. La conductancia cae abruptamente para $V_1, V_2 \neq 0$, excepto en la línea de $V_2 = 0$ debido al efecto Kondo de espín. Las líneas negras corresponden a $V_1 = \pm V_2$. Debido a los efectos inelásticos también hay un aumento de la conductancia a lo largo de estas líneas.

$V_2 = 0$ debido a la degeneración espín remanente que conduce a un efecto Kondo $SU(2)$. Las líneas negras en la figura corresponden a $V_1 = \pm V_2$. A lo largo de estas líneas hay contribuciones inelásticas que aumentan la conductancia. El origen de estos picos a voltaje finito se discute en el **Capítulo 9**. Estos pueden ser pasados por alto si las propiedades de transporte se calculan sin cuidado, utilizando las densidades de estados de equilibrio.

Cuando la simetría orbital se rompe por la acción del desdoblamiento pseudo-Zeeman δ las conductancias de ambos puntos no son iguales. Los mapas de G_1 y G_2 se muestran en el panel superior de la Fig. 1.13 para $\delta = E_2 - E_1 = 0.5$. El escenario es mucho más complicado. El punto más interesante es que, como consecuencia de las correlaciones orbitales en el régimen de Kondo, hay contribuciones cruzadas a la corriente a través de ambos puntos cuánticos. Estas contribuciones inelásticas al transporte se puede observar en las líneas de $V_1 = \pm V_2 \pm 2\delta$. Esto puede ser entendido como una consecuencia de la modificación de las densidades de estados fuera de equilibrio. En la Fig. 1.13(a) ρ_1 y (b) ρ_2 se muestran para $V_1 = 0$ y varios valores de V_2 . Este punto es importante, ya que a los fines de realizar una verdadera espectroscopía, la densidad de estados ρ_i no debería verse afectada por el voltaje aplicado.

Restauración de una simetría $SU(4)$ efectiva

Desde un punto de vista experimental es muy difícil realizar la simetría $SU(4)$. En el caso del sistema de dos puntos cuánticos las hibridaciones

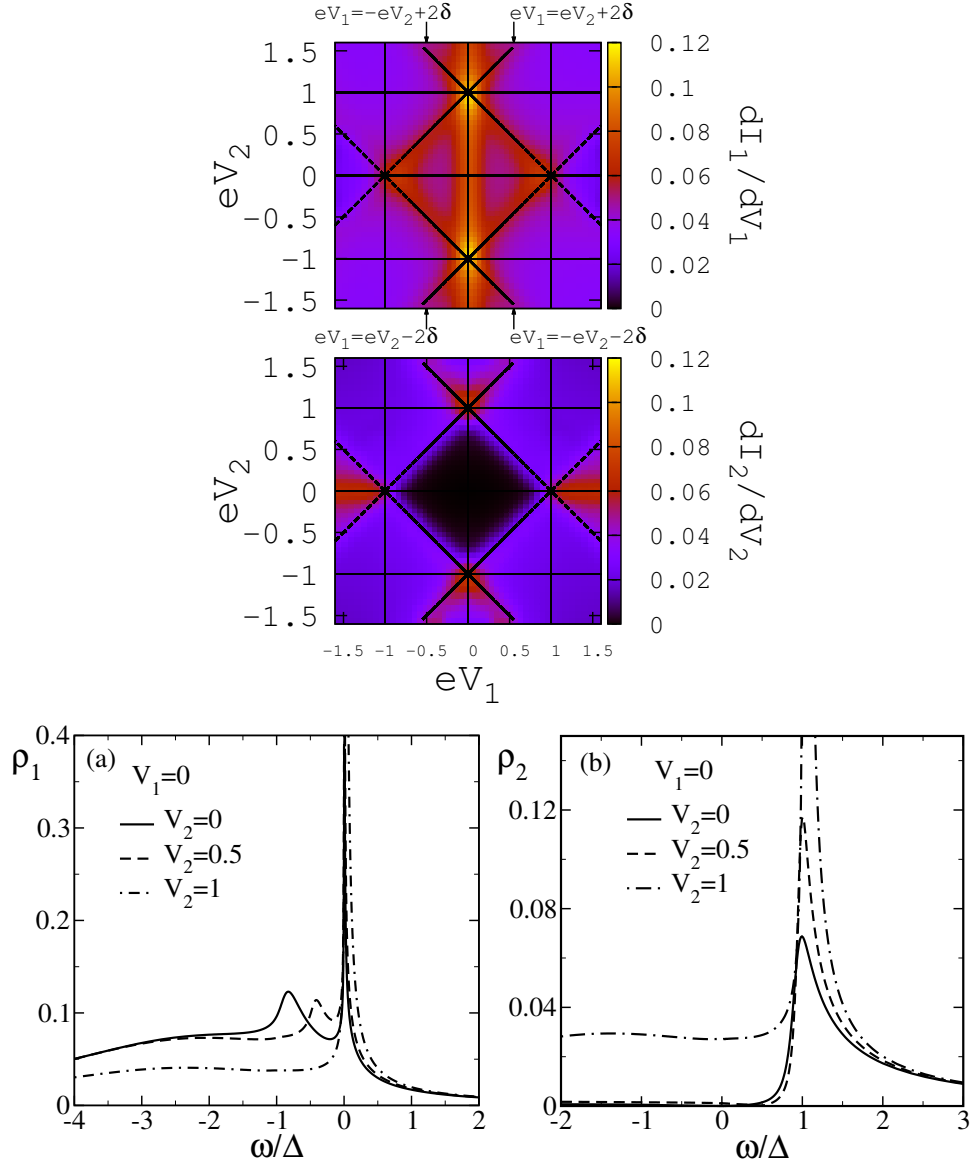


Figura 1.13: (panel superior) Conductancia diferencial $G_i = dI_i/dV_i$ del QDi como función de los voltajes V_1 , V_2 en el caso de un desdoblamiento pseudo-Zeeman $\delta = 0.5$. Las líneas discontinuas corresponden a $V_1 = \pm V_2 \pm 2\delta$. Es posible observar propiedades de transporte muy interesantes como consecuencia de las correlaciones cruzadas (orbitales). Las contribuciones inelásticas a la conductancia pueden entenderse a partir de la modificación de las densidades de estado fuera de equilibrio (a) ρ_1 y (b) ρ_2 . Estas se muestran para diferentes valores de V_2 y $V_1 = 0$.

totales deben ser las mismas $\Gamma_1 = \Gamma_2$. Si no es el caso, el la simetría se pierde. A pesar del hecho de que ambos dobletes estén degenerados, si uno de ellos está más acoplado, se convierte en el único relevante a bajas temperaturas. En el **Capítulo 10** mostramos cómo la simetría $SU(4)$ se puede restaurar de forma efectiva ajustando adecuadamente las energías E_1 y E_2 [Tosi et al., 2015]. Se discuten resultados experimentales recientes sobre la

física del efecto Kondo SU(4) en un sistema de dos puntos cuánticos [Keller et al., 2014].

Parte III: El acoplamiento con modos bosónicos

En la **tercera parte** de la tesis presento nuestros resultados sobre el efecto del acoplamiento electrón-fonón en las propiedades de transporte de sistemas fuertemente correlacionados. Nuestra atención se centra principalmente en moléculas donde hay un acoplamiento entre la carga electrónica y las vibraciones que ha demostrado afecta las propiedades de transporte [Park et al., 2000] [Smit et al., 2002] [Zhitenev et al., 2002] [Fernández-Torrente et al., 2008].

En las moléculas, los orbitales moleculares juegan el papel de los niveles localizados que son importantes para el transporte. La repulsión de Coulomb entre electrones puede ser muy grande y los transistores moleculares han dado pruebas de efectos de bloqueo de Coulomb y efecto Kondo (con T_K desde 1 hasta 100 K) [Kubatkin et al., 2003] [Parks et al., 2010] [Liang et al., 2002]. Estamos interesados sobre todo en moléculas, ya que también están presentes fenómenos de interferencia [Guédon et al., 2012] [Vazquez et al., 2012] y hay un debate abierto sobre los fonones como fuente de decoherencia [Ballmann et al., 2012]. La descripción de la interferencia con nuestro modelo, por tanto, no está completa sin una comprensión del efecto que las vibraciones pueden tener. Creemos que es un paso adelante ya que la teoría utilizada para discutir el papel de los fonones [Härtle et al., 2011] no tiene en cuenta la interacción electrón-electrón. La pregunta que nos gustaría responder es si el acoplamiento electrón-fonón afecta a las propiedades de transporte de una manera tan dramática que la interferencia cuántica resulta completamente borrada o si sobrevive. Esta pregunta es difícil de responder. La razón es que ambos, la descripción de la interferencia y el acoplamiento con un modo de vibración en un sistema con interacciones fuertes son por sí mismos problemas difíciles. Estudiamos primero el efecto de los fonones considerando un solo doblete [Roura-Bas et al., 2013]. Los detalles del modelo se dan en el **Capítulo 11** y nuestros resultados de las propiedades de transporte de no equilibrio en el régimen de Kondo se presentan en el **Capítulo 12**. Algunos resultados preliminares del efecto de los fonones en nuestro modelo de interferencia se presentan en el **Capítulo 13**.

Estudiamos las propiedades de transporte de una molécula que puede ser modelada con un Hamiltoniano de Anderson-Holstein. Hemos tenido en cuenta sólo un doblete de energía E_d conectado a fuente y sumidero con una hibridación total Δ y considerado sólo un modo de vibración de frecuencia ω_0 acoplado a la carga total en la molécula con intensidad λ . En la Fig. 1.14(a) la densidad de estados electrónica se muestra en el régimen de Kondo a bajas temperaturas para varios valores de λ . La energía del nivel localizado en ausencia de fonones es $E_d = -0.5$ en unidades de $\omega_0 = 1$.

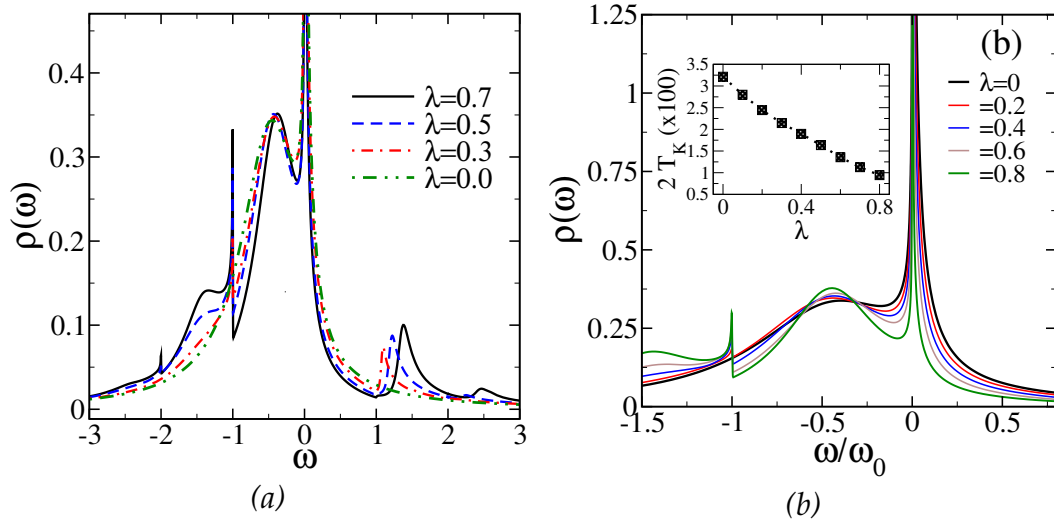


Figura 1.14: Contribución electrónica a la densidad de estados a bajas temperaturas en presencia de un modo de vibración de frecuencia $\omega_0 = 1$ para diferentes acoplamientos electrón-fonón λ . (a) La energía del nivel localizada se toma como $\tilde{E}_d = \tilde{E}_d^0 = E_d - \lambda^2/\omega_0$, con $E_d = -0.5$. (b) La energía del nivel localizado es \tilde{E}_d , sintonizada para mantener fijo el pico de transferencia de carga. En el recuadro interior se muestra la temperatura de Kondo como función de λ .

El primer efecto de los fonones es renormalizar esta energía. Si no hubiera mezcla con los electrones de conducción, la energía renormalizada sería $\tilde{E}_d^0 = E_d - \lambda^2/\omega_0$. Cuando se toma en cuenta la hibridación con los cables conductores, esta corrección sería todavía la esperada para acoplamiento λ muy grande. Las densidades de estados mostradas en la figura corresponden a $\tilde{E}_d^0 = -0.5$. El pico a $\omega \sim \tilde{E}_d^0$ es el pico de transferencia de carga. Como otro efecto de los fonones, hay réplicas de este pico en $\omega \sim \tilde{E}_d^0 - \omega_0$ y $\omega \sim \tilde{E}_d^0 - 2\omega_0$. A bajas temperaturas el efecto Kondo se desarrolla y se produce un incremento de la densidad de estados electrónica cerca del nivel de Fermi. La resonancia Kondo cerca de $\omega \sim 0$ tiene también réplicas. Las réplicas son más intensas para mayor acoplamiento electrón-fonón. Estas réplicas son más claras a frecuencias negativas: $\omega \sim -\omega_0, -2\omega_0$. En el **Capítulo 12** se discuten las razones que nos hacen afirmar que las réplicas a la frecuencia positiva también corresponden con el pico Kondo. Es de destacar que existan réplicas de la resonancia Kondo. Esto significa que el estado de muchos cuerpos que entrelaza electrones de conducción y electrones localizados se replica de manera coherente en un espacio con $\pm n$ fonones. Hay un experimento muy reciente en una molécula de cobre-ftalocianina donde la conductancia diferencial muestra un pico a voltaje cero que corresponde a la resonancia Kondo y también réplicas en voltajes simétricos $\pm V_0$ que se identifican como réplicas de la resonancia Kondo debidas a un modo de vibración de frecuencia $eV_0 = \hbar\omega_0$. Los resultados son apoyados por cálculos *ab initio*. Las intensidades de las réplicas de la resonancia Kondo parecen seguir la misma dependencia en temperatura que la correspondiente a un espín 1/2 en el régimen de Kondo [Rakhmilevitch et al., 2014]. Actualmente

estamos trabajando para reproducir los resultados experimentales.

Como respuesta a la adición de la carga en la molécula, la energía electrostática puede bajar por un estiramiento de las ligaduras, pagando un poco de energía elástica. Esta es la forma en que el modo de vibración está acoplado a la carga total de $(-e)\langle n_d \rangle$. En la ausencia de hibridación, el acoplamiento de electrones y fonones puede ser eliminado por un cambio en la posición de equilibrio del oscilador acompañado de un cambio de energía $-\lambda^2/\omega_0$. Las funciones de onda fonones se centran en diferentes posiciones dependiendo de n_d . En presencia de la hibridación, el número de electrones no está bien definido (fluctúa). Todavía es posible eliminar el acoplamiento de electrones y fonones con una transformación de Lang-Firsov. Si los fonones son desacoplados para obtener un modelo electrónico efectivo, la hibridación se renormaliza exponencialmente. Esto es razonable ya que está dada por el elemento de la matriz entre los estados con diferente n_d y por lo tanto por la superposición de funciones de onda de fonones que están desplazadas unas con respecto a las otras. Si la hibridación se reduce de forma exponencial, esto afecta a la energía ganada por los procesos con la banda de conducción. Más importante, esto da una reducción exponencial de la temperatura de Kondo con λ . Esto no se observa en tratamientos más rigurosos [Hewson and Meyer, 2002]. Hemos resuelto el problema con la aproximación *non-crossing* (NCA) modificando las auto-energías para incluir el acoplamiento a los fonones. Ambos, el acoplamiento a la banda de conducción y el acoplamiento electrón-fonón son tratados en pie de igualdad en la NCA (detalles en el **Apéndice E**).

En la Fig. 1.14(b) la densidad de estados electrónica se muestra para diferentes valores de λ . En este caso hemos cambiado el valor de E_d manteniendo fija la posición del pico de transferencia de carga $\tilde{E}_d(\lambda)$ para cada λ . Nos encontramos con que $\tilde{E}_d(\lambda)$ es ligeramente mayor que $-\lambda^2/\omega_0$. Esto es razonable ya que para acoplamiento electrón-fonón chico es conveniente tener un cambio más pequeño en la posición de equilibrio del oscilador y favorecer la hibridación. Como se muestra en el *recuadro interior*, el ancho mitad a la mitad del máximo de la resonancia Kondo, relacionada con la temperatura de Kondo, depende suavemente de λ . [Roura-Bas et al., 2013]

Este estudio preliminar fue fundamental para entender el efecto de los fonones en el régimen de Kondo. El problema completo de tener un modo de vibración en un sistema que presenta interferencia cuántica se trata al final, en el **Capítulo 13**. Es trabajo en curso.

Parte IV: Hacia experimentos en 2DEGs

Al principio de mi tesis apareció la posibilidad de realizar experimentos de transporte mesoscópico. He dedicado una gran cantidad de tiempo y esfuerzo durante esta tesis a la realización de experimentos en gases de electrones bidimensionales (2DEGs). Ponerse al día con los conocimientos experimentales en rápido desarrollo en estos sistemas es una formidable, si

no imposible, tarea para una vida doctoral media. Sin embargo, pude conseguir algunos avances en esta dirección y hay una parte extra destinada a estos primeros pasos.

Los gases de electrones bidimensionales son una plataforma increíble para la física mesoscópica. El sistema estudiado en particular es el 2DEG formado en la interfaz de una heteroestructura semiconductor de GaAs/Al-GaAs dopada con Si. En este caso, las mobilities del orden de $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ han sido alcanzadas y una amplia gama de densidades de portadores. El carácter bidimensional del gas de electrones hace que sea muy adecuado para el estudio del efecto Hall cuántico (QHE) (entero y fraccionario) y de las propiedades de los estados de borde. Por otra parte, mediante la deposición de electrodos metálicos en la parte superior de la muestra, y la aplicación de tensiones negativas, se puede conseguir el vaciamiento de algunas regiones del gas y por lo tanto definir diferentes geometrías. De esta manera, la cuantización de la conductancia se demostró como una prueba de la presencia de canales de conducción como responsables de las propiedades de transporte. Con la geometría adecuada se pueden formar regiones donde los electrones se encuentran confinados cuyas propiedades se asemejan a las de átomos. Estos átomos artificiales o puntos cuánticos presentan niveles discretos de energía y, dependiendo del tamaño, una repulsión de Coulomb efectiva que los hace interactuantes. Características del efecto Kondo y del bloqueo de Coulomb se han medido en estos sistemas. La combinación de varios puntos cuánticos para formar arreglos es un problema experimental muy complicado, pero es una posibilidad potencial para una realización experimental de sistemas mesoscópicos donde la interferencia cuántica sea sintonizable.

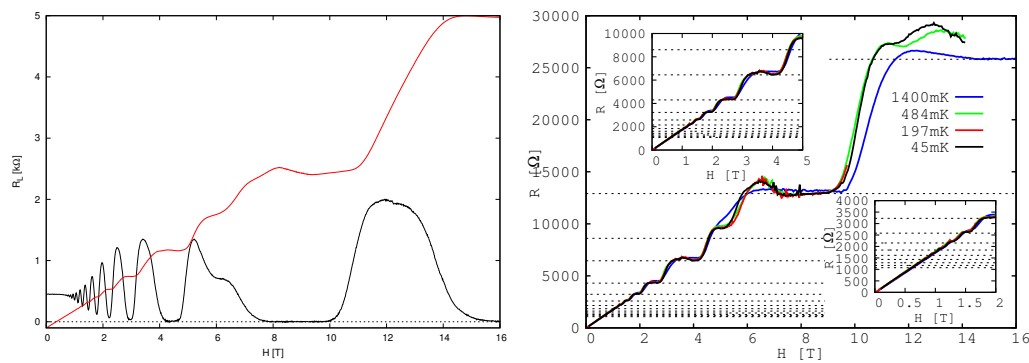


Figura 1.15: Resistencia longitudinal y Hall como una función del campo magnético para diferentes temperaturas.

En el camino hacia arreglos de puntos cuánticos, hay un montón de pasos previos:

- (i) *Contacto con el gas:* El 2DEG está 100 nm por debajo de la superficie. Con el fin de obtener una corriente que fluya a través de él, es necesario conectarlo con reservorios de electrones a izquierda y derecha. Un

buen método para hacer esto es formar contactos óhmicos. El procedimiento estándar es dibujar los contactos, evaporar una aleación (Au, Ge, Ni) y crear una reacción con temperatura haciendo un recocido térmico rápido (FTA). El punto de partida es una descripción detallada de este proceso. En particular, la modificación de un evaporador Joule disponible para permitir la co-evaporación de tres materiales y la construcción y prueba de un FTA hecho en casa.

- (ii) *Definición de la mesa*: Las diferentes partes del gas tienen que estar aisladas unas de otras. Para ello se fabrica *una mesa*. La geometría de la mesa se define por litografía y grabado húmedo.
- (iii) *Caracterización del gas*: Los parámetros que caracterizan el gas de electrones son la densidad de portadores n y la movilidad μ . Ambas se pueden obtener realizando una medición Hall.
- (iv) *QHE*: Para campos magnéticos intensos, el espectro de energía cambia dramáticamente debido a la formación de niveles de Landau. Estos representan las órbitas cuantificadas descritas por los electrones en el plano perpendicular al campo. El transporte en el sistema está dominado por estados de borde, que son como *skipping orbits* en los bordes de la muestra. Como se muestra en la Fig. 1.15 la resistencia longitudinal y transversal presentan un comportamiento muy particular en función del campo magnético. Esta es una firma del efecto Hall cuántico entero. Se presentan los resultados de las mediciones para diferentes muestras y a diferentes temperaturas. En particular, se observó una estructura que depende del ángulo de forma no trivial en los plateaus Hall, que no son del todo claras, pero que podrían deberse a una cierta falta de homogeneidad en el gas de electrones.
- (vi) *Contacto puntual*: La geometría deseada para la trayectoria de electrones puede ser obtenida mediante voltajes negativos en electrodos metálicos que se denominan grillas de tensión. Éstas se definen por litografía electrónica y luego deposición de Al. Este procedimiento fue probado para crear un contacto puntual cuántico (QPC) aunque no se presentan resultados.

Como es evidente, todavía hay mucho trabajo por hacer.

Revisión Bibliográfica

“Como todos los hombres de la Biblioteca, he viajado en mi juventud; he peregrinado en busca de un libro, acaso del catálogo de catálogos; ahora que mis ojos casi no pueden descifrar lo que escribo, me preparo a morir a unas pocas leguas del hexágono en que nací. Muerto, no faltarán manos piadosas que me tiren por la baranda; mi sepultura será el aire insondable; mi cuerpo se hundirá largamente y se corromperá y disolverá en el viento engendrado por la caída, que es infinita. Yo afirmo que la Biblioteca es interminable. Los idealistas arguyen que las salas hexagonales son una forma necesaria del espacio absoluto o, por lo menos, de nuestra intuición del espacio. (...) Básteme, por ahora, repetir el dictamen clásico: LA BIBLIOTECA ES UNA ESFERA CUYO CENTRO CABAL ES CUALQUIER HEXAGONO, CUYA CIRCUNFERENCIA ES INACCESIBLE.”

J. L. Borges

La Biblioteca de Babel en El jardín de senderos que se bifurcan (1941)

El objeto de la presente tesis es el estudio de las propiedades de transporte de sistemas mesoscópicos / nanoscópicos donde las correlaciones causadas por la fuerte interacción electrón-electrón juegan un papel muy importante. A lo largo del texto se dan las referencias que son específicas a cada capítulo. Hay, sin embargo, algunas que constituyen un fondo común a todo el trabajo. Estas referencias dan el marco adecuado para situar nuestras contribuciones y también ilustrar la motivación de nuestra búsqueda. El propósito de esta revisión bibliográfica es nombrar y comentar brevemente estas referencias. He hecho una selección de los artículos y libros que me introdujeron en el tema, los que me acompañaron a lo largo de estos años ayudándome a entender los experimentos y la teoría y los que presentan propuestas interesantes y preguntas abiertas. En otras palabras, se trata de una revisión bibliográfica personal.

Física mesoscópica

Los sistemas estudiados en esta tesis son parte del área de investigación cada vez mayor de la física mesoscópica. Una introducción muy general se puede encontrar en el libro de Imry [Imry, 1997]. La característica de estos sistemas es la aparición de una gran variedad de fenómenos que tienen un origen cuántico. Los avances en las técnicas de fabricación y las capacidades de medición han hecho posible realizar sistemas experimentales que exhiben un comportamiento cuántico en una escala más grande que un átomo,

hasta varios micrones en algunos casos. Ya sea por una reducción de las dimensiones típicas del sistema o por un aumento de la longitud de coherencia (enfriando a temperaturas muy bajas o fabricando una muestra muy limpia), estas escalas características se hacen comparables y la naturaleza ondulatoria de la materia se hace evidente. Además, cuando la longitud de onda de las partículas en el sistema (la longitud de onda de Fermi para los electrones, o la longitud de onda de De Broglie en general) es comparable a su tamaño, hay efectos de cuantificación debido al confinamiento. Incluso es posible tener una dimensionalidad efectiva inferior.

Transporte en sistemas mesoscópicos

En particular, las propiedades de transporte se alteran notablemente en sistemas mesoscópicos. Partiendo de una discusión sobre los posibles regímenes alcanzables en función de la relación entre las escalas pertinentes, el libro de Datta [Datta, 2003] es una buena introducción para el transporte en sistemas mesoscópicos. Está dedicado sobre todo a la física de los gases de electrones bidimensionales (2DEGs). Una gran cantidad de trabajo experimental se ha hecho sobre el 2DEG formado en la interfaz de una heteroestructura de AlGaAs/GaAs dopado con Si, que está bien introducida en el libro. En particular, el efecto Hall cuántico (QHE) [v. Klitzing et al., 1980] y la cuantificación de la conductancia en contactos puntuales cuánticos [van Wees et al., 1988] [Wharam et al., 1988] se discuten en términos de modos transversales. La teoría de transporte que se presenta es una imagen de una sola partícula basada en una descripción de la dispersión. Según afirman van Houten y Beenakker “la cuantización del transporte de electrones balísticos a través de una constricción demuestra que la conducción es la transmisión” [van Houten and Beenakker, 1996]. La corriente transportada por los modos transversales puede ser transmitida o reflejada de vuelta por lo que cada conductor puede ser caracterizado por un conjunto de coeficientes de transmisión. Esto sigue el formalismo de Landauer [Landauer, 1970] y la extensión de Büttiker [Büttiker, 1986] para los casos en los que hay muchos terminales en el sistema. Estas ideas se presentan brevemente en el **Capítulo 3** con un énfasis particular en la conexión entre los coeficientes de transmisión y las funciones de Green. Esta se basa principalmente en un trabajo de Fisher y Lee [Fisher and Lee, 1981] donde esta conexión se prueba para un sistema no interactuante. La ventaja de las funciones de Green es que son adecuadas para el tratamiento de sistemas más complicados, tales como aquellos en los que las interacciones electrón-electrón son importantes. Una revisión muy completa de resultados experimentales y teóricos en los sistemas semiconductores se puede encontrar en el paper de Beenakker [Beenakker and van Houten, 1991]. Los aspectos más relevantes en relación con el transporte a través de conductores balísticos y desordenados (incluyendo la cuantificación de la conductancia, los efectos de localización débil y su dependencia con el campo magnético, el enfoque de electrones y los

efectos de interferencia) se discuten en esta revisión. Las propiedades de transporte en sistemas mesoscópicos también se tratan en el libro de Ferry [Ferry and Goodnick, 1997] y en el último libro de Datta [Datta, 2005] que generaliza las ideas del formalismo de dispersión a una gran variedad de sistemas.

Entre los sistemas mesoscópicos que exhiben comportamientos cuánticos interesantes, aparte de los semiconductores, mucho trabajo se ha hecho en sistemas metálicos con junturas túnel como bloques de construcción. Usando una isla metálica muy pequeña, se demostró que era posible controlar el número de electrones en el sistema y para agregarlos uno por uno [Esteve, 1992]. Esta clara observación de la cuantificación de la carga se basa en el fenómeno de bloqueo de Coulomb. En el libro editado por Gruber y Devoret [Grabert and Devoret, 1992] este fenómeno se presenta en el contexto de los sistemas metálicos. Hay una presentación de los dispositivos experimentales propuestos para investigar la naturaleza discreta de transferencia de carga: la caja de electrones individuales y el transistor de electrón único (SET). La carga en la isla metálica está bien definida porque hay un costo de energía para añadir electrones al sistema. Esta energía es la energía de carga E_C que se debe a la repulsión electrón-electrón y se puede tomar en cuenta de manera efectiva en términos de una capacitancia C_Σ como $E_C = e^2/2C_\Sigma$. Para islas muy pequeñas, esta energía es mucho mayor que la energía térmica y las fluctuaciones de carga son insignificantes si las barreras túnel son suficientemente opacas ($R_T > h/e^2$). Con la ayuda de una tensión de compuerta, el número estable de electrones se puede variar. La teoría para describir los experimentos también se discute en el libro y se basa en el cálculo de las tasas de *tunneling* [Ingold and Nazarov, 1992]. Hay una introducción agradable y simple al SET orientado a una amplia comunidad de Devoret [Devoret and Glattli, 1998]. El libro de Nazarov y Blanter [Nazarov and Blanter, 2009] es una referencia muy actualizada que incluye sistemas tanto metálicos como semiconductores.

Es digno de mencionar que una de las notables ventajas de los sistemas metálicos con respecto a los semiconductores es que es mucho más fácil inducir superconductividad. Utilizando junturas Josephson como el elemento principal, el estudio de la superconductividad mesoscópica se ha convertido en un gran campo de investigación por sí mismo.

Puntos cuánticos o átomos artificiales

El efecto de la interacción electrón-electrón también se observó en semiconductores. Esto está relacionado con uno de los efectos más llamativos del confinamiento: la posibilidad de emular el comportamiento de átomos artificiales. De hecho, el 2DEG formado en heteroestructuras semiconductoras constituye una plataforma excelente para la construcción de átomos y moléculas artificiales con un gran control de los parámetros. Típicamente, el gas se encuentra 100 nm debajo de la superficie por lo que utilizando electrodos

metálicos depositados en la parte superior y aplicando tensiones negativas, es posible modificar el potencial visto por los electrones. Dependiendo del nivel de Fermi, algunas regiones se vacían y es posible de esta forma definir la geometría de la muestra en el gas de electrones incluyendo regiones muy pequeñas en las que los electrones resultan confinados. Cuando el tamaño de estas regiones es comparable a la longitud de onda de Fermi, el espectro de energía de los electrones se vuelve discreto, como en un átomo. Estos átomos artificiales también son llamados puntos cuánticos (QDs). En contraste con los átomos reales, los puntos cuánticos están formados por unos pocos o muchos (miles) de electrones. Esto depende del tamaño de las regiones confinadas. Si los puntos cuánticos son pequeños, también es posible observar el efecto del bloqueo de Coulomb debido a la energía de carga que representa el costo para poner dos electrones en el mismo nivel. Hay tres artículos populares por Reed [Reed, 1993], Kastner [Kastner, 1993] y Kouwenhoven [Kouwenhoven and Marcus, 1998] que introducen los puntos cuánticos. En su mayoría se centran en puntos cuánticos semiconductores que pueden ser laterales (fabricados con grillas electrostáticas) o verticales (fabricados por ataque físico o químico).

Varios experimentos se han realizado en puntos cuánticos para estudiar las propiedades de transporte. El artículo de revisión de Kouwenhoven [Kouwenhoven et al., 1997] es un excelente retrato del estado del arte en 1997. Presenta un gran resumen de los experimentos y la teoría en estos sistemas con énfasis en el efecto de bloqueo de Coulomb. Este se observa en las propiedades de transporte como una supresión de la corriente a bajo voltaje (y bajas temperaturas). Como en las islas metálicas, el número de electrones en un punto cuántico puede ser controlado con grillas electrostáticas. Cada vez que la diferencia de energía para agregar un electrón coincide con el potencial de electro-químico de los electrodos, hay un aumento en la corriente (la corriente no es lineal) observado como un pico en la conductancia [Kastner, 1992] [Kastner, 2000]. En esta tesis, algunos de los principales resultados se refieren a QDs. En el caso particular de los puntos cuánticos verticales en semiconductores fabricados por ataque químico, el espectro de energías electrónicas se puede medir en experimentos de transporte en un régimen de unos pocos electrones [Kouwenhoven et al., 2001]. El potencial que confina los electrones es muy simétrico y los niveles de energía se corresponden muy bien con las órbitas esperadas en un potencial central 2D. Más espectacular, la ocupación de los niveles se produce de acuerdo con las reglas de Hund como consecuencia de la gran repulsión de Coulomb. Se ha encontrado una evolución rica y complicada de los picos en la conductancia con el campo magnético.

Los niveles localizados de los puntos cuánticos pueden ser ocupados por los electrones de conducción que tunelean desde la fuente o el sumidero. A su vez, un electrón que ocupa un estado localizado puede saltar a los cables conductores. En este sentido, los niveles localizados están *hibridados* con las bandas de conducción. Si los puntos se hacen muy pequeños, la repulsión de Coulomb se hace muy grande. Para un número impar de electrones en el

QD el estado localizado se convierte en degenerado ya que puede ser ocupado por un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo. Desde el punto de vista del espín, este estado se comporta como un espín localizado interactuando con los electrones de conducción. Por debajo de una cierta temperatura, las correlaciones de espín-espín se vuelven dominantes y dan lugar al desarrollo de un estado de muchos cuerpos que entrelaza electrones localizados y de conducción en un *singlete*. Esto se conoce como el efecto Kondo. Fue nombrado después de J. Kondo [Kondo, 1964] que estudió la contribución espín-espín a la tasa de dispersión entre los electrones de conducción en un metal y el momento localizado de una impureza magnética. Él mostró que había una anomalía logarítmica a bajas temperaturas debido a los términos de inversión de espín que podían explicar el mínimo en la resistividad observado en algunos metales. Ha habido varias realizaciones experimentales del efecto Kondo en puntos cuánticos semiconductores [Goldhaber-Gordon et al., 1998b] [Goldhaber-Gordon et al., 1998a] [Cronenwett et al., 1998] [Simmel et al., 1999] [Schmid et al., 1999] [van der Wiel et al., 2000]. En contraste a las impurezas magnéticas en un metal, en el caso de los sistemas nanoscópicos hay un gran control de los parámetros y es posible probar diferentes regímenes, verificar leyes de escala, reglas de suma y explorar nuevas propuestas [Zaffalon et al., 2008] [Grobis et al., 2008]. En el artículo de divulgación por Kouwenhoven y Glazman [Kouwenhoven and Glazman, 2001] se puede encontrar una buena introducción al efecto Kondo en sistemas nanoscópicos. El efecto está caracterizado por propiedades de transporte muy interesantes como un pico en la conductancia diferencial a voltaje cero a bajas temperaturas.

Además, los puntos cuánticos no son específicos de los semiconductores. A lo largo de los años, muchos sistemas han demostrado comportarse como átomos artificiales. La idea de los puntos cuánticos es más general y se aplica a los sistemas que presentan un conjunto discreto de niveles de energía correspondientes a los estados localizados originados por el confinamiento de los electrones. Por ejemplo, la física del bloqueo de Coulomb y el efecto Kondo ha sido reportada en el transporte a través de moléculas orgánicas [Park et al., 2002] [Liang et al., 2002] y nanotubos de carbono [Nygård et al., 2000]. En estos últimos, las mediciones han demostrado la simetría electrón-hueco [Jarillo-Herrero et al., 2004] y *tunneling* tipo Klein en muestras ultra limpias [Steele et al., 2009] debido a las propiedades relativistas de los portadores de carga. Ha habido realizaciones del efecto Kondo en puntos cuánticos verticales con espín más grande que $1/2$ [Sasaki et al., 2000] y pruebas de efecto Kondo SU(4) [Sasaki et al., 2004]. El efecto Kondo SU(4) emerge en la presencia de degeneración adicional que puede ser orbital (valle). También se ha realizado en un transistor de un solo átomo hecho con un nanocable de Si [Tettamanzi et al., 2012].

El efecto Kondo

Una introducción agradable y completa a la física de Kondo se puede encontrar en el libro de Hewson [Hewson, 1997]. Hay un poco de la historia partiendo de los primeros experimentos en metales que mostraban un mínimo en la resistividad a bajas temperaturas, los modelos que se han propuesto para describir los resultados experimentales, el cálculo perturbativo hasta tercer orden hecho por Kondo mostrando la anomalía logarítmica a bajas temperaturas y las ideas del grupo de renormalización por Anderson y Wilson. Una gran cantidad de referencias útiles se citan en el libro. Aunque está orientado a sistemas de fermiones pesados, los ingredientes claves para entender el efecto Kondo están muy bien explicados. Uno de los modelos más populares para describir el problema de Kondo se debe a Anderson [Anderson, 1961]. El modelo de Anderson también es importante para el trabajo presentado en esta tesis. El modelo describe una impureza magnética localizada en un mar de electrones de conducción. La impureza magnética es un átomo con un orbital muy localizado (3d o 4f) que puede ser ocupado por los electrones de conducción. Un electrón que ocupa el estado localizado puede saltar a la banda de conducción y otro electrón puede entrar en la impureza. Este proceso de hibridación conduce a un tiempo de vida finito del estado localizado. El punto importante considerado por el modelo es que la repulsión electrón-electrón es grande y si la energía del nivel localizado está por debajo del nivel de Fermi del metal, la impureza permanece magnética a altas temperaturas. La repulsión de Coulomb hace que el modelo sea difícil de resolver. Hay un régimen en el que la energía del estado localizado está muy por debajo del nivel de Fermi por lo que está siempre ocupada. Si la energía que cuesta la repulsión electrón-electrón es lo suficientemente grande, la ocupación del estado localizado es cercana a uno. La degeneración del estado es $2J + 1$. Hay procesos virtuales en los que un electrón con proyección m deja la impureza y otro electrón con m' ocupa el orbital localizado. Kondo demostró que estos procesos son los responsables de la anomalía logarítmica en la resistividad de los metales a bajas temperaturas [Kondo, 1964].

Esta imagen de inversión de espín es equivalente a la idea de Kondo de dispersión entre el momento magnético localizado y los espines de los electrones de conducción. Aunque este era un paso adelante en la comprensión del efecto Kondo, estaba claro que el problema no podría resolverse perturbativamente debido a la divergencia logarítmica a bajas temperaturas. La razón es que la escala relevante del problema, la temperatura de Kondo, depende exponencialmente de la hibridación. Esto significa que una serie perturbativa cortada para unos pocos ordenes no permite recuperar la física de Kondo. Para resolver el problema de Kondo, es necesario introducir las ideas de escala y del grupo de renormalización. Las leyes de escala para el problema Kondo fueron introducidas por Anderson (escaleo del hombre pobre) [Anderson, 1970]. La solución casi exacta llegó con Wilson de la mano del grupo de renormalización [Wilson, 1975].

Hay varios métodos propuestos para resolver el modelo Anderson (o el problema de impureza). Yafet y Varma [Yafet and Varma, 1985] fueron capaces de estimar la temperatura Kondo utilizando una función variacional, teniendo en cuenta el estado Kondo como un estado singlete formado por los electrones de conducción y los localizados. Hay una proposición por Coleman [Coleman, 1984] basada en la introducción de partículas auxiliares y una aproximación diagramática. En esta tesis se resuelve el modelo de Anderson numéricamente con la aproximación *non-crossing* (NCA) [Brickers et al., 1987] [Kroha and Wölfle, 1998]. El punto de partida en NCA es la introducción de partículas auxiliares propuesta por Coleman. Se basa en una expansión diagramática en la hibridación donde diagramas de todos los órdenes (sin tener en cuenta los diagramas con cruces) se suman y se condensan en un conjunto de ecuaciones de Dyson que debe resolverse auto-consistentemente. Esta es una de las aproximaciones de N grande [Brickers, 1987], donde N es la degeneración. Entre los métodos de solución, los resultados del grupo de la renormalización numérica (NRG) son considerados casi exactos y se utilizan para probar otras técnicas por comparación [Krishna-murthy et al., 1980a] [Krishna-murthy et al., 1980b] [Costi et al., 1994]. El modelo de Anderson puede resolverse analíticamente con el Bethe-Ansatz [Wiegmann, 1980] [Kawayami and Okiji, 1981] [Okiji and Kawakami, 1983].

La aproximación *non-crossing* es una aproximación conservativa en el sentido de Baym [Baym and Kadanoff, 1961] [Baym, 1962]. La temperatura Kondo T_K está bien reproducida y da las propiedades termodinámicas adecuadas. Sin embargo, no satisface las propiedades del líquido de Fermi por debajo de $T_K/10$. Una comparación con NRG ha sido reportada por Costi [Costi et al., 1995] mostrando un buen acuerdo en el rango donde la NCA no viola la regla de suma de Friedel [Langreth, 1966]. En esta tesis, se utiliza la NCA porque tiene varias ventajas con respecto a otras técnicas. En primer lugar, es posible extender la NCA para tratar los problemas fuera de equilibrio. Esto es muy importante para estudiar las propiedades de transporte. En particular, las características de energía finita son accesibles dentro de NCA mientras que pueden ser pasados por alto por otras técnicas. En segundo lugar, no es difícil extender la NCA a más de un nivel localizado (problemas multi-orbitales). Esto puede ser muy costoso computacionalmente para otras técnicas más robustas tales como el NRG. A pesar de que se limita a temperaturas más altas, considero que la NCA es “más cercana a los experimentos” (temperaturas y voltajes finitos) y que los resultados son fiables.

El modelo de Anderson en el transporte

La realización del transistor de un solo electrón con puntos cuánticos semiconductores mostró la relevancia de la interacción electrón-electrón en las regiones pequeñas de electrones confinados. Los puntos cuánticos pe-

pequeños tienen un conjunto discreto de estados localizados y exhiben gran repulsión de Coulomb. La conductancia muestra una estructura periódica de picos en función del voltaje de compuerta que se debe al efecto de bloqueo de Coulomb. La similitud entre los estados localizados en pequeños QDs conectados con cables a fuente y sumidero y la impureza magnética en el metal sugirió que una realización del efecto Kondo era posible en un circuito nanoscópico controlado. Las consecuencias del efecto Kondo en el transporte fueron predichas por Glazman [Glazman and Raikh, 1988] y T. K. Ng [Ng and Lee, 1988] de forma independiente mediante un formalismo de *tunneling* resonante. Predijeron las características esperadas en el experimento, que fueron luego confirmadas. A principios de los años 90, Meir y Wingreen utilizaron el formalismo de funciones de Green para resolver el modelo de Anderson a altas temperaturas y explicar la presencia de la estructura periódica de picos en la conductancia en función del voltaje de compuerta debido al bloqueo de Coulomb en puntos cuánticos pequeños [Meir and Wingreen, 1991]. Derivaron una expresión general para calcular la corriente a través de las regiones interactuantes. Esta expresión, inspirada en el modelo de Anderson, es muy general y permite tratar situaciones fuera de equilibrio a temperatura finita en presencia de interacciones fuertes. La fórmula se reduce a la expresión de Landauer para sistemas sin interacciones [Meir and Wingreen, 1992]. Esta expresión y la conexión con el formalismo de dispersión se discuten en **Capítulo 3**. Como una aplicación muy interesante, Meir y Wingreen analizaron el desarrollo del efecto Kondo a bajas temperaturas cuando hay un número impar de electrones en el QD [Meir et al., 1993] y discutieron las características del efecto Kondo fuera de equilibrio. Estas predicciones también fueron posteriormente verificadas, en particular, el desdoblamiento del pico de voltaje cero debido a los diferentes potenciales químicos de los cables. Con el fin de resolver el modelo Anderson y calcular las propiedades de transporte, los autores proponen la aproximación *non crossing*. La razón principal es que se puede extender fácilmente para resolver el problema fuera de equilibrio [Wingreen and Meir, 1994]. En esta tesis se siguió la misma idea y resolvimos el modelo de Anderson con la NCA.

Moléculas artificiales. Arreglos de QDs y manipulación de espín

A lo largo de los años, sistemas con más de un punto cuántico se han explorado, tanto teórica como experimentalmente. El gran control de los parámetros permitieron formar moléculas artificiales [Waugh et al., 1995] e incluso cristales artificiales [Kouwenhoven et al., 1990], con la posibilidad de cambiar las energías locales, los acoplamientos entre puntos y las barreras túnel. Esto ha abierto la puerta a un vasto universo de propuestas (y experimentos) que se basan en el control y la manipulación de espín y carga.

-*Dos puntos cuánticos, moléculas artificiales:* Algunos resultados relevantes de las propiedades de transporte de sistemas con dos puntos cuánticos puede encontrarse en la revisión de van der Wiel [van der Wiel et al., 2003]. En este artículo, se considera el caso en que los puntos cuánticos están conectados en serie y la evolución del diagrama de estabilidad se estudia como función del acoplamiento entre los puntos. Se muestra que es posible comenzar con dos puntos cuánticos bien definidos para terminar con un único punto más grande aumentando el acoplamiento. Un sistema de dos puntos cuánticos también se ha utilizado para demostrar el acoplamiento de dos impurezas Kondo que forman estados *bonding* y *anti-bonding* [Jeong et al., 2001]. Esta es una realización mesoscópica modesta de las interacciones RKKY que se producen en las redes Kondo. La manipulación coherente de estados moleculares también es discutida por Holleitner et al. [Holleitner et al., 2002] [Holleitner et al., 2004], por Chen et al. [Chen et al., 2004] y por Craig et al. [Craig et al., 2004] entre otros.

-*Dos puntos cuánticos, qubits de carga:* Si los dos puntos cuánticos interactúan entre sí el número de electrones en cada punto no está bien definido. Es posible alcanzar un régimen donde dos configuraciones con el mismo número total de electrones se convierte en degenerada. En este caso, el sistema se comporta como un qubit de carga con los estados 1/0 mapeados en la ocupación de QD1/QD2. El qubit puede ser manipulado con pulsos microondas [Frey et al., 2012].

-*Dos puntos cuánticos, correlaciones orbitales y efecto Kondo:* El estudio del efecto Kondo en sistemas formados por dos puntos cuánticos con acoplamiento capacitivo es muy interesante debido al grado adicional -orbital- de libertad. Uno de los regímenes interesantes del sistema corresponde a la línea de coexistencia que separa dos configuraciones de carga $(1, 0) \leftrightarrow (0, 1)$, donde (N_1, N_2) indica el número de electrones en cada punto. En esta línea hay una degeneración de cuatro: en espín y pseudo-espín. El papel de las correlaciones de pseudo-espín se puso de manifiesto en los primeros trabajos de Wilhelm et al. [Wilhelm et al., 2002]. Se demostró que el efecto Kondo a bajas temperaturas no era como el caso ordinario de espín 1/2 [Hübel et al., 2008]. Esto motivó aún más trabajo teórico para analizar la posibilidad de realizar un efecto Kondo SU(4) en un sistema de dos puntos cuánticos. Borda et al. [Borda et al., 2003] propusieron que esto podría ser utilizado como un filtro de espín y en un experimento reciente, un sistema de DQD ha demostrado ser adecuado para llevar a cabo la espectroscopía de la función de onda de Kondo [Amasha et al., 2013]. Nosotros hemos calculado las propiedades de transporte de este sistema fuera de equilibrio para discutir los resultados experimentales (ver **Capítulo 9**). Otro régimen interesante corresponde al punto de degeneración entre los estados de uno y dos electrones $(1, 0) \leftrightarrow (1, 1) \leftrightarrow (2, 0)$. Este régimen se ha explorado teóricamente [Galpin et al., 2005] y experimentalmente [Okazaki et al., 2011] y es candidato a presentar una transición de fase cuántica singlete-triplete en función de los parámetros.

-*Tres puntos cuánticos*: Sistemas con tres QDs también se realizaron experimentalmente. El mapa de la estabilidad del sistema se midió [Gaudreau et al., 2006] y los estados de espín se controlaron de manera coherente [Gaudreau et al., 2012]. Este sistema fue propuesto como un filtro de espín [Delgado et al., 2008]. Discuto esta posibilidad en el **Capítulo 4**. Recientemente, el problema de la frustración de carga en un sistema de tres QDs se ha abordado [Seo et al., 2013] destacando el papel de las interacciones y la excitante posibilidad de comprender la frustración en un experimento controlado.

-*Arreglos de QDs*: La mejora de la Microscopía por Efecto Túnel (STM) permitió un gran control sobre la posición de los átomos en la superficie y la medición del efecto Kondo para diferentes muestras magnéticas [Jamneala et al., 2001]. En particular, se observó un increíble efecto de espejismo cuántico en un corral formado por átomos de Co [Manoharan et al., 2000]. Esto pone de manifiesto la posibilidad de crear arreglos de puntos cuánticos para probar otros efectos como los de interferencia.

-*Manipulación de espín en puntos cuánticos semiconductores*: Cuando los puntos cuánticos se hacen pequeños, la energía de carga es grande y en el caso en que hay un número total impar de electrones, hay un espín no apareado que puede ser pensado como un espín localizado. La manipulación de los estados de espín electrónicos en puntos cuánticos se ha explorado en busca de la promesa de nuevos sistemas de procesamiento de información [Engel et al., 2004]. Varios experimentos se han realizado donde se discute el posible control de estados de espín y la coherencia. [Petta et al., 2005] [Hanson et al., 2007]. Lamentablemente, debido a diversos mecanismos de decoherencia los qubits de espín semiconductores no han podido seguir la carrera contra los qubits superconductores basados en junturas Josephson.

Interferencia cuántica en el transporte

Uno de las observaciones más representativas del transporte mesoscópico es la presencia de efectos de interferencia. Esta es una clara manifestación de la naturaleza ondulatoria de los portadores y de la coherencia de fase. He centrado parte del trabajo realizado en los efectos de interferencia en las propiedades de transporte a través de sistemas interactuantes. Nuestro principal aporte es un estudio de la interrelación entre la interferencia cuántica y el efecto Kondo (ver **Capítulo 7**). Hemos propuesto un modelo para tener en cuenta los efectos de interferencia y demostrado que en algún régimen de alta simetría es posible tener una supresión total de la corriente.

Algunas de las primeras manifestaciones de interferencia cuántica en sistemas mesoscópicos se discuten en la revisión de Beenakker [Beenakker and van Houten, 1991]. Como un ejemplo, el efecto Aharonov-Bohm [Aharonov and Bohm, 1959] se demostró en el transporte a través de anillos metálicos micrométricos [Webb et al., 1985] [Chandrasekhar et al., 1985]. En el experimento el anillo está atravesado por un campo magnético y el potencial vector entra en la función de onda de los electrones como una fase. Los elec-

trones atraviesan el anillo a través de uno de los brazos (ambos son equivalentes) y ya que el sistema es coherente en fase, la información contenida en la fase de la función de onda no se pierde ¹. Es posible observar oscilaciones en la corriente como función del campo magnético como consecuencia de la interferencia. El período de las oscilaciones es una combinación de constantes universales: hc/e , el cuanto de flujo. El papel de las correlaciones electrón-electrón en anillos mesoscópicos fue investigado por Jagla y Balseiro quienes mostraron que afectan a la periodicidad de las oscilaciones de conductancia debido a efectos de separación de la carga y el espín [Jagla and Balseiro, 1993]. Más recientemente, el efecto Aharonov-Casher [Aharonov and Casher, 1984] se demostró en un pequeño conjunto de anillos semiconductores mesoscópicos [Bergsten et al., 2006].

El camino libre medio largo de los electrones en heteroestructuras semiconductoras ha hecho de estos sistemas una plataforma excelente para la realización de interferómetros [Imry, 1997]. En particular, se han utilizado para poner a prueba la coherencia del transporte mediada por *tunneling* resonante mediante la colocación de un punto cuántico en uno de los brazos del interferómetro [Kubatin et al., 1998]. Por otra parte, en el régimen Kondo, esta configuración se ha utilizado para verificar la fase de la transmisión que según se predijo debería ser proporcional a la mitad del número de electrones en la impureza de acuerdo con la regla de suma de Friedel [Y. Ji et al., 2000]. Una gran cantidad de trabajo teórico y experimental se ha hecho en estos interferómetros llamados de “cuál-camino?”. Hay varios estudios teóricos de interferómetros Aharonov-Bohm mesoscópicos con un punto cuántico en uno de los brazos [Kang and Shin, 2000] [Gerland et al., 2000] [König and Gefen, 2001] [Hofstetter et al., 2001] que discuten el comportamiento de la fase de la transmisión, el período de las oscilaciones con campo magnético y las posibles asimetrías en la corriente.

Otros sistemas que también se proponen como candidatos para mostrar los efectos de interferencia son arreglos de puntos cuánticos. Estos sistemas son más difíciles de realizar experimentalmente. Por ejemplo, Delgado *et al.* sugirieron utilizar el efecto Aharonov-Bohm en un sistema de tres puntos cuánticos asimétrico para obtener una corriente polarizada en espín [Delgado et al., 2008]. En el caso estudiado por los autores, la degeneración de espín se rompe por el campo magnético y no es necesario analizar el efecto Kondo. El efecto de las interacciones en los arreglos de puntos cuánticos fue discutido por Lobos y Aligia en el régimen de Kondo [Lobos and Aligia, 2008]. El problema es más difícil en presencia de la interacción electrón-electrón.

Tomando como inspiración el estudio del transporte a través de moléculas tipo anulenos [Rincón et al., 2009], se observó que la interferencia cuántica en sistemas de muchos cuerpos se produce cuando dos estados de N electrones se vuelven degenerados con un estado de $N \pm 1$ electrones. La posible ocupación de un estado u otro es equivalente a la elección del brazo

¹En realidad la función de onda de los electrones “sensa” en el sentido de Feynmann todos los caminos posibles. Esta expresión es una simplificación para entender la idea.

en el anillo metálico o a los posibles “caminos” en una descripción Feynmaniana. Dependiendo de la simetría de estos estados y de la geometría de la conexión, una diferencia de fase puede aparecer conduciendo a fenómenos de interferencia. Teniendo esto en cuenta hemos construido un modelo de interferencia que llamamos el *modelo de Aligia*. Este modelo se presenta en el **Capítulo 5**. En particular, en el caso en que N es impar, los estados de muchos cuerpos son dobletes debido a la degeneración de espín y en el límite de una fuerte repulsión electrón-electrón, los electrones entran uno a la vez en el sistema y es posible estudiar la interrelación entre la interferencia cuántica y el efecto Kondo (ver **Capítulo 7**). El modelo es adecuado para describir las propiedades de transporte en una gran variedad de sistemas. Nosotros lo hemos aplicado a una molécula de benceno (ver **Capítulo 8**) que presenta una interferencia destructiva parcial al conectar los electrodos en la posición *meta*.

Transportes a través de moléculas. Interferencia y vibraciones.

El camino hacia la electrónica molecular comenzó hace no tanto tiempo a finales de los '90 [Reed et al., 1997]. El uso de moléculas como parte de los dispositivos electrónicos es un campo reciente de intensa actividad de investigación que implica tanto retos experimentales como teóricos. Una muy buena introducción a este campo con una gran cantidad de experimentos y teoría es el libro de Cuevas y Scheer [Cuevas and Scheer, 2010]. Para dar cuenta de la relevancia del tema, hay una revisión reciente de Aradhya y Venkataraman que hace hincapié en la ventaja de las propiedades mecánicas, ópticas y térmicas de las moléculas para ir más allá del transporte y construir dispositivos sin análogo clásico [Aradhya and Venkataraman, 2013].

En el lado experimental, hay varias técnicas que se han mejorado para poner en contacto a las moléculas con electrodos metálicos y probar las propiedades de transporte en la escala de una sola molécula. Usando electromigración, por ejemplo, el efecto Kondo se demostró en transistores de una sola molécula [Liang et al., 2002] [Park et al., 2002]. En estos experimentos, las moléculas se describen como puntos cuánticos. Los estados localizados son los orbitales moleculares que se hibridan con los electrodos metálicos. Con el uso de tensiones de compuerta, las energías de estos estados pueden ser variadas y la corriente se puede cambiar entre encendido y apagado. Aparecen regiones de corriente suprimida debido al bloqueo de Coulomb y por esta razón en la literatura estos dispositivos se denominan transistores moleculares [Cornaglia et al., 2004]. El transporte a través de moléculas permite probar su estructura electrónica y los resultados experimentales se puede entender muy bien con el complemento de cálculos *ab initio* [Nitzan and Ratner, 2003] [Solomon et al., 2010].

Otros experimentos en el régimen de una sola molécula utilizan un STM

con una punta de oro para formar junturas oro-molécula-oro de forma repetitiva y estudiar de las propiedades de transporte con herramientas estadísticas. Analizan, por ejemplo, el decaimiento exponencial del acoplamiento como una función de la longitud de la molécula [Xu and Tao, 2003]. Existen otras propuestas utilizando dos nanopartículas de oro añadidas a una molécula de tiol para contactarla con un nanogap microfabricado [Dadosh et al., 2005] y también un experimento donde se prueban diferentes estados redox en cadenas poliméricas depositadas en la parte superior de los electrodos de un transistor de efecto de campo [Kubatkin et al., 2003]. Los autores también discuten el acoplamiento fuerte o débil usando cadenas poliméricas de diferentes longitudes [Danilov et al., 2008]. Un estudio sistemático del acoplamiento a los electrodos teniendo en cuenta la superposición de orbitales π fue realizado por Venkataraman *et al.* [Venkataraman et al., 2006] quienes encuentran una proporcionalidad $\sim \cos^2(\alpha)$ con el ángulo α entre los orbitales. El estado del arte en 2006 con una gran cantidad de referencias útiles está en la revisión de Tao [Tao, 2006].

Dependiendo del grado de localización y del acoplamiento a los electrodos (o al sustrato), las moléculas pueden presentar espines desapareados o incluso casos más complicados con mayor espín ($S = 1$). Una transición de fase cuántica entre un estado triplete y singlete se demostró recientemente en C_{60} [Roch et al., 2008] y también se observaron las características del efecto Kondo *underscreened* [Roch et al., 2009]. Esto también se estudió en un complejo orgánico con Co conectado a una junta creada por rotura que permitió estirar la molécula (rompiendo la simetría del entorno visto por el átomo de Co) [Parks et al., 2010].

Desde las primeras mediciones, los modos de vibración de las moléculas han demostrado desempeñar un papel relevante. Como ejemplo, un experimento con una molécula de fullereno conectado a electrodos de oro mostró evidencia de contribuciones inelásticas a la corriente debido al acoplamiento con las vibraciones [Park et al., 2000]. El acoplamiento electrón-fonón fue utilizado por Smit *et al.* para investigar el transporte a través de una molécula de hidrógeno utilizando una junta creada por rotura controlable mecánicamente (MCBJ) [Smit et al., 2002]. El papel de las vibraciones en pequeñas junturas moleculares también fue destacado por Zhitenev *et al.* que alcanzó este límite de una sola molécula con una junta fabricada en la punta del STM utilizando evaporación con sombra [Zhitenev et al., 2002]. Más recientemente, Kim *et al.* realizaron espectroscopía electrónica túnel inelástica para caracterizar los modos de vibración de una molécula en una MCBJ formada en Au y Pt [Kim et al., 2011]; y recientemente Rakhmilevitch *et al.* han demostrado el efecto de fonones en el régimen de Kondo [Rakhmilevitch et al., 2014].

El papel de las vibraciones en presencia de correlaciones fuertes ha sido ampliamente estudiado [König et al., 1996] [Hewson and Meyer, 2002] [Paaske and Flensberg, 2005] [Cornaglia et al., 2005] [Balseiro et al., 2006]. Algo que resulta de interés actual es que la evidencia experimental pone en discusión las propiedades de escala de las réplicas de la resonancia Kondo

en la conductancia diferencial. Hemos estudiado el efecto del acoplamiento electrón-fonón en el régimen Kondo (ver **Capítulo 12**) y calculado las propiedades de transporte fuera de equilibrio. Cálculos anteriores se basan en el formalismo de la ecuación de movimiento para las funciones de Green [Monreal and Martin-Rodero, 2009] [Monreal et al., 2010] o en una aproximación de desacoplamiento de los fonones [Yong et al., 2007] [Yu et al., 2008]. Estos modelos electrónicos efectivos conducen a una dependencia equivocada de la temperatura Kondo con el acoplamiento de electrones y fonones. Nosotros hemos estudiado este problema con la aproximación *non crossing* tratando el acoplamiento con los fonones y la hibridación con los electrones de conducción en pie de igualdad.

Nuestro principal interés es comprender el efecto del acoplamiento de electrones y fonones en los fenómenos de interferencia. Como se discutió, nuestro modelo de interferencia se inspira en moléculas tipo anulenos (con forma de anillo). De hecho, las moléculas tienen ciertas simetrías heredadas por los orbitales moleculares y dependiendo de la forma en que están conectados la fuente y el sumidero, es posible observar efectos de interferencia. Una propuesta en este sentido fue hecha por Cardamone y Stafford [Cardamone et al., 2006] [Stafford et al., 2007]. Ellos sugieren la realización de un transistor por efecto de interferencia cuántica (QuIET). A diferencia de nuestro modelo, los autores no tienen en cuenta la fuerte interacción de Coulomb. Aunque esto suena aún complicado de realizarse de forma experimental, se han producido avances increíbles. En un experimento reciente Guédon *et al.* probaron la existencia de interferencia destructiva en el transporte a través de moléculas utilizando monocapas auto-ensambladas de antraceno mono- y di-tiolado (AC-MT, AC-DT) y de antraquinona (AQ-MT, AQ-DT) [Guédon et al., 2012]. A pesar del hecho de que no es un experimento de una sola molécula, la transmitancia muestra una depresión en el nivel de Fermi para el AQ-MT y una conductancia dos órdenes de magnitud inferior en el AQ-DT (en comparación con el AC-DT) como consecuencia de la interferencia destructiva parcial. Los autores apoyan sus resultados con un cálculo *ab initio* de la estructura electrónica y la transmisión utilizando un formalismo de Landauer. Los autores afirman que el carácter de ser conjugada-transversal de la molécula AQ es clave para entender la presencia de interferencia destructiva [Valkenier et al., 2014]. Experimentos de una sola molécula fueron realizados por Vázquez *et al.* demostrando la violación de la ley clásica de Kirchoff de superposición para circuitos electrónicos debido a la presencia de interferencia constructiva [Vazquez et al., 2012]. Ballmann *et al.* también informan sobre la presencia de interferencia destructiva en el transporte a través de moléculas individuales que se infiere indirectamente por un aumento de la conductancia al aumentar la temperatura [Ballmann et al., 2012]. Según los autores, a medida que la temperatura aumenta, el número de fonones se vuelve más importante y también la decoherencia. Esto conduce a una pérdida de interferencia destructiva y, por tanto, a un aumento de la conductancia. La teoría presentada por los autores se basa en un artículo de Härtle [Härtle et al., 2011] que no toma en cuen-

ta las interacciones electrón-electrón. Por lo tanto, creemos que el estudio del efecto de fonones en los fenómenos de interferencia es hoy en día un problema relevante.

PARTE I

Interferencia en sistemas fuertemente correlacionados

Estudio teórico del transporte en sistemas mesoscópicos

"The ongoing miniaturization of solid state devices often leads to the question: "How small can we make resistors, transistors, etc., without changing the way they work?" The question can be asked a different way, however: "How small do we have to make devices in order to get fundamentally new properties?" By "new properties" we particularly mean those that arise from quantum mechanics or the quantization of charge in units of e ; effects that are only important in small systems such as atoms. "What kind of small electronic devices do we have in mind?" Any sort of clustering of atoms that can be connected to source and drain contacts and whose properties can be regulated with a gate electrode. Practically, the clustering of atoms may be a molecule, a small grain of metallic atoms, or an electronic device that is made with modern chip fabrication techniques. It turns out that such seemingly different structures have quite similar transport properties and that one can explain their physics within one relatively simple framework."

Leo Kouwenhoven

Electron transport in quantum dots, proceedings of the Advanced Study Institute on Mesoscopic Electron Transport (1997)

3.1 Conductancia a partir de la transmisión.

3.2 El lenguaje de funciones de Green.

3.3 Un tratamiento general para la corriente.

Este capítulo está dedicado a la introducción de los elementos teóricos necesarios para el tratamiento del problema del transporte en sistemas mesoscópicos. Una gran cantidad de trabajo se ha hecho para cubrir la amplia variedad de fenómenos que se pueden encontrar. Además, diferentes enfoques para el problema han mostrado proporcionar una buena comprensión de la física subyacente y también capacidad de predicción. Es el propósito de la siguiente introducción la presentación de algunos conceptos y resultados importantes y la discusión de la **conexión entre la descripción de las propiedades de transporte en términos de coeficientes de transmisión, por un lado y el lenguaje de funciones de Green, por el otro.**

He decidido evitar cuentas excesivamente largas y más bien preferí explicar los conceptos e ideas en detalle. Como complemento he preparado un "kit de supervivencia" que se puede encontrar en el **Apéndice A**.

3.1. Conductancia a partir de la transmisión

Una cuestión de escalas

En sistemas mesoscópicos se pueden obtener diferentes regímenes de transporte en función de la relación entre las escalas que son relevantes para el problema concreto que se analiza [Datta, 2003]. Las escalas típicas que deben considerarse son *i)* las dimensiones características del sistema: longitud L , ancho W ; *ii)* la longitud de onda de Fermi en el caso de los electrones λ_F o la longitud de onda de De Broglie en general, *iii)* los caminos libres medios elásticos e inelásticos l_e y l_{in} y *iv)* la longitud de coherencia ξ . También se podría incluir una longitud térmica λ_T y una longitud magnética, como el radio de sincrotrón r_C . Cuando el tamaño del sistema es menor que ξ , se dice que éste es **coherente** o coherente en fase. Dentro de este límite, la información contenida en la fase de la función de onda de los portadores no se pierde al viajar a través del sistema. La longitud de coherencia depende principalmente del camino libre medio inelástico, porque estos son el tipo de procesos que conducen a una pérdida de coherencia de fase. De este modo, la condición para la coherencia se asocia normalmente a la de $L, W \ll l_{in}$. La condición de la coherencia es esencial para la interferencia cuántica. Por otro lado, el camino libre medio elástico se asocia con la evolución del impulso. Si $L, W \gg l_e$, el transporte se dice difusivo ¹. Si $L, W \ll l_e$, se dice que el conductor es **balístico** ². Cuando las dimensiones características del sistema se vuelven comparables a la longitud de onda de los portadores hay efectos de cuantificación. Entre otras consecuencias, esto puede conducir a una dimensionalidad efectiva, tales como 2D (por ejemplo 2DEGs), 1D (por ejemplo, nanocables) o incluso 0D (por ejemplo los puntos cuánticos).

Las otras escalas relevantes son las escalas de energía y de tiempo, que están, por supuesto, relacionadas con las anteriores. En cuanto a las escalas de energía, las consideradas típicamente son: la energía de Fermi ϵ_F , la energía suministrada por el voltaje aplicado eV_b , la temperatura T , la repulsión de Coulomb U y la energía Zeeman. Las escalas de tiempo importantes están dadas por las tasas de los diferentes procesos: τ_e^{-1} (τ_ϕ^{-1}) la tasa de dispersión elástica (inelástica).

Está claro que hay muchos escenarios posibles que conducen a una gran variedad de fenómenos de transporte [Imry, 1997] [Ferry and Goodnick, 1997] [Datta, 2005]. Este trabajo se centra en conductores coherentes y balísticos. Para la descripción teórica de transporte en estos sistemas es posible desarrollar un formalismo basado en canales de conducción que llevan la corriente. La conductancia de un conductor mesoscópico puede ser relacionada con la transmisión característica de este tipo de guías de ondas de

¹En este caso l_{in} se puede calcular en términos del coeficiente de difusión D y del tiempo de relajación difusivo τ_ϕ , que es la inversa de la tasa de dispersión inelástica: $l_{in} = \sqrt{D\tau_\phi}$

²Para un conductor balístico, el camino libre medio inelástico puede ser calculado como la distancia media recorrida por los portadores entre dos eventos de dispersión inelástica, es decir, $l_{in} = v_F\tau_\phi$.

electrones.



Figura 3.1: Dos reservorios de electrones con potenciales electro-químicos μ_L y μ_R están conectados a un sistema mesoscópico que puede ser descrito en términos de modos transversales. La longitud del sistema es L y el ancho es W .

Guías de onda de electrones

Dentro de un conductor balístico el impulso de los portadores se conserva durante su paso desde un electrodo al otro. Si la temperatura es suficientemente baja y el voltaje aplicado no es grande, los estados importantes para el transporte de corriente son aquellos cuyo impulso k está cerca del impulso de Fermi k_F . Cuando se reducen las dimensiones del sistema, hay un efecto directo en el número de estos estados.

Un caso particular de interés, ampliamente estudiado experimental y teóricamente, es el gas de electrones de dos dimensiones (2DEG) formado en heteroestructuras semiconductoras [Beenakker and van Houten, 1991] [Datta, 2003]. Hay una gran cantidad de detalles con respecto a los 2DEGs, pero por el momento para esta introducción es suficiente considerarlos como un sistema experimental en el que el movimiento de los electrones está limitado a un plano. De esta manera, la muestra se obtiene definiendo un circuito en este sistema 2D, por ejemplo, como una barra de longitud L y de ancho W ³. Dos electrodos macroscópicos metálicos están conectados a la barra en los lados izquierdo y derecho, como se muestra en la Fig. 3.1. La pregunta es cuáles son las propiedades de transporte de este sistema.

El Hamiltoniano del 2DEG en ausencia de campo magnético es casi el de un gas libre, es decir, una energía cinética con una masa efectiva m . Dada la barra, también hay una energía potencial que tiene en cuenta el confinamiento dentro de L y W . Ajustando la orientación de L a lo largo del eje x , si $W \ll L$ el potencial de confinamiento $V(y)$ es el más relevante y la ecuación de Schrödinger resulta

$$H(x, y)\Psi(x, y) = E\Psi(x, y).$$

La función de onda se puede descomponer en ondas planas e^{ikx} en la dirección x y un conjunto de soluciones $\{\chi_n(y)\}$ en la dirección y satisfaciendo

$$\tilde{H}(y)\chi_n(y) = E_n\chi_n(y),$$

³Esto puede llevarse a cabo mediante técnicas estándar de micro-fabricación.

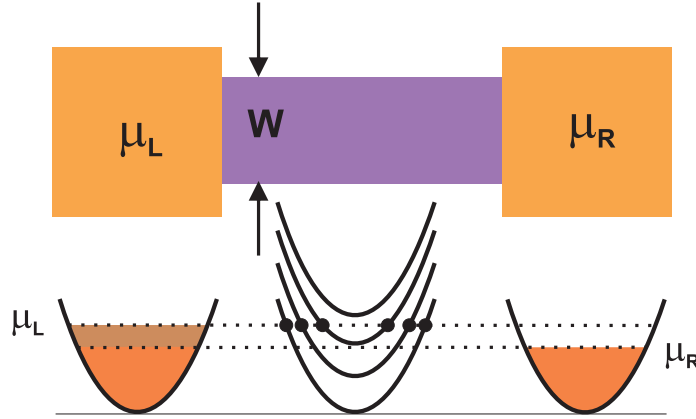


Figura 3.2: Los electrones en los reservorios están en equilibrio con sus potenciales electroquímicos. En el electrodo de la izquierda (derecha), los estados electrónicos son ocupados hasta μ_L (μ_R). La relación de dispersión se muestra en la parte inferior en función de k_x . En los electrodos hay un continuo de estados posibles ya que cualquier k_y es posible. En el conductor mesoscópico, las energías son $E_n = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + e_n$. Las parábolas están desplazadas a causa del confinamiento. Los modos transversales que se encuentran entre μ_L y μ_R pueden ser ocupados y son responsables de transportar la corriente.

donde $\tilde{H}(y) = e^{-ikx} H e^{ikx}$. Por lo tanto, la función de onda es $\Psi_n(x, y) = \chi_n(y) e^{ikx}$ con autoenergía $E_n = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + e_n$. Como en un pozo de potencial, existe un espectro discreto de energía. Las soluciones cuantificadas en la dirección y se denominan **modos transversales**. Cada uno de estos modos se comporta como un canal cuasi unidimensional. La separación típica en energía de estos modos va como $1/W^2$. Dependiendo de W , el número de estados que lleva corriente se puede variar.

Para el cálculo de la corriente en el sistema es necesario agregar algunas hipótesis sobre los electrodos. Los contactos metálicos macroscópicos son considerados como reservorios de electrones donde los electrones termalizan y llegan a un equilibrio con los potenciales electroquímicos $\mu_\nu = \epsilon_F - eV_\nu$, donde $\nu = L$ (R) denota izquierda (derecha). A bajas temperaturas, cuando se aplica una pequeña tensión tal que $\mu_L > \mu_R$, aparece una corriente. Los electrodos se consideran no-reflectantes, es decir, los electrones que viajan de izquierda a derecha están termalizados con μ_L e ingresan en el electrodo de la derecha sin probabilidad de reflexión. Esto es razonable para grandes reservorios de carga. A su vez, los electrones que viajan de derecha a izquierda están termalizados con μ_R y entran en el electrodo de la izquierda también sin reflexión. Como se muestra en la Fig. 3.2, los modos transversales importantes son aquellos cuyas energías e_n están entre μ_L y μ_R . En el caso simple en que hay un **único** modo que satisface esta condición, la corriente neta que fluye de izquierda a derecha está dada por el producto de la carga eléctrica $-e$, la velocidad v_k y la densidad de portado-

res por unidad de longitud ⁴

$$I = I_L - I_R = 2 \frac{1}{L} \sum_k [f_L(\epsilon_k) - f_R(\epsilon_k)] (-e) v_k,$$

donde el 2 viene de la degeneración de espín y $f_L(\epsilon_k)$ ($f_R(\epsilon_k)$) es la función de distribución de Fermi del reservorio izquierdo (derecho). Convirtiendo la suma en una integral y teniendo en cuenta que $v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon_k}{dk}$,

$$I = \frac{-2e}{h} \int dE [f_L(E) - f_R(E)]. \quad (3.1)$$

Esto es una consecuencia del hecho de que los canales son cuasi unidimensionales. La corriente es fácil de calcular a temperatura cero (o muy baja)

$$I = \frac{-2e}{h} (\mu_L - \mu_R), \quad (3.2)$$

y por lo tanto, la conductancia de este único modo transversal se puede encontrar sencillamente

$$G = \frac{I}{V_L - V_R} = \frac{2e^2}{h}.$$

Este es el cuanto de conductancia $G_0 = \frac{2e^2}{h} = [12.906 \text{ k}\Omega]^{-1}$. Está claro que, dado que los modos transversales se comportan como canales independientes, todos ellos contribuyen con la misma cantidad cuando $\mu_R < \epsilon_n < \mu_L$. Si hay M de estos estados,

$$G = \frac{2e^2}{h} M.$$

La cuantización de la conductancia en múltiplos enteros de G_0 se verificó experimentalmente en 2DEGs usando contactos puntuales cuánticos [Webb et al., 1985] [Wharam et al., 1988]. Estos son constricciones formadas en el 2DEG utilizando compuertas electrostáticas. Con el control de la tensión de compuerta, el ancho W de la constricción se puede reducir y a bajas temperaturas se puede observar cómo cae la conductancia en escalones.

Conexión de conductores a través de guías de ondas de electrones

Este cálculo de la corriente a través de las guías de ondas de electrones es válido sólo para canales conductores perfectos. Un caso más general (ver Fig. 3.3) consiste en considerar un sistema formado por dos reservorios (μ_L , μ_R), un conductor central H_C no necesariamente balístico y dos guías de onda de electrones perfectas (cables izquierdo y derecho) que los conectan.

⁴La corriente se obtiene integrando la densidad de corriente $J_x(y)$ en el ancho W . Si $J_x(y) = J_x$, entonces I es simplemente J_x multiplicado por W , es decir, la corriente puede ser calculada utilizando el número de portadores por unidad de longitud.

Esto establece las bases de un problema de transporte muy general. Dos enfoques muy útiles van a ser presentados, indicando en qué casos son o no apropiados. Utilizan un lenguaje ligeramente diferente y en algún punto esta introducción puede considerarse como un pequeño diccionario.

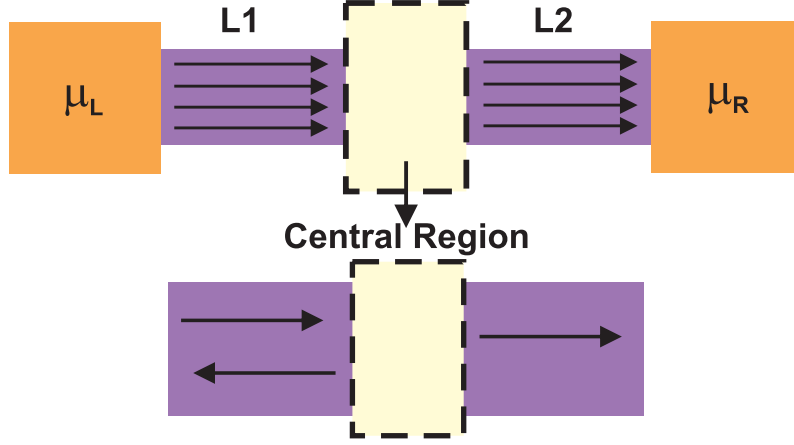


Figura 3.3: (superior) Dos reservorios de electrones están conectados a un conductor central a través de los cables L1 y L2. Las propiedades de transporte del sistema dependen de los detalles microscópicos del conductor central. Sin embargo, es posible encontrar una expresión para la corriente y la conductancia en términos de los coeficientes de transmisión del conductor central (véase el texto). (inferior) Una parte de la corriente viajando de izquierda a derecha en un modo dado del cable L1 a L2 se transmite con probabilidad \mathcal{T} y otra parte es reflejada de nuevo con probabilidad $1 - \mathcal{T}$.

La corriente a través de toda la estructura está determinada por los detalles microscópicos del conductor central. Esto puede ser evitado si el problema se plantea como un problema de **dispersión** [Imry, 1997]. De hecho, el conductor central se trata como una barrera de potencial. Puede ser caracterizado por un **coeficiente de transmisión** \mathcal{T} . Como se muestra en la Fig. 3.3, una parte de la corriente proveniente de la izquierda I^+ se refleja con probabilidad $1 - \mathcal{T}$ (dando origen a una corriente de derecha a izquierda I^-). Para un modo transversal, la corriente en el cable izquierdo (LL) es

$$I_{LL} = I^+ - I^- = I^+ - (1 - \mathcal{T})I^+ = \mathcal{T}I^+,$$

Por lo tanto, usando la Ec. (3.2)

$$I_{LL} = \frac{-2e}{h} \mathcal{T} [\mu_L - \mu_R].$$

Análogamente, la corriente que fluye hacia la derecha en el cable derecho da $I_{RL} = I_{LL}$ (como debe ser para la conservación de la corriente). La conductancia resultante está dada por

$$G = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}.$$

Esta es la conductancia para un modo transversal activo cuya transmisión \mathcal{T} es el valor en la energía de Fermi y se considera constante en el intervalo del voltaje aplicado. Si se consideran M modos transversales y una transmisión promedio \mathcal{T} para todos ellos, la conductancia está dada por la fórmula de Landauer [Landauer, 1970]

$$G = \frac{2e^2}{h} M \mathcal{T}. \quad (3.3)$$

La generalización simple de canales con diferentes transmisiones es $G = \frac{2e^2}{h} \sum_n \mathcal{T}_n$. El conjunto de coeficientes de transmisión $\{\mathcal{T}_n\}$ caracterizan a un conductor mesoscópico.

Una configuración multi-terminal

Para la medición de las propiedades de transporte en sistemas mesoscópicos es necesario incluir las terminales de voltaje. Estas conexiones tienen que ser tratadas en igualdad de condiciones que los cables considerados previamente de fuente y sumidero [Büttiker, 1986]. El formalismo multi-terminal ha sido utilizado para interpretar la cuantización de la resistencia Hall y la ausencia de resistencia longitudinal en el régimen del efecto Hall cuántico [v. Klitzing et al., 1980] [Beenakker and van Houten, 1991] y para demostrar la validez de la relación de Onsager entre la corriente y la tensión en presencia de un campo magnético [Büttiker, 1986]. En una configuración de cuatro terminales, si la corriente se inyecta entre los cables 1-2 y, si se mide la tensión entre 3-4, luego debe verificarse, $R_{12,34}(B) = R_{34,12}(-B)$.

Como se muestra en la Fig. 3.4, el caso general que se describe es el de varias terminales cada una acoplada a un reservorio μ_p con el conductor a través del cable p .

El cálculo de la corriente en el cable p es como sigue. Los electrones procedentes del cable q están termalizados con μ_q , por lo que su función de distribución es $f_q(E)$. Parte del flujo de corriente puede pasar al cable p a través de la transmisión $\mathcal{T}_{q \rightarrow p}$. Esta transmisión es el resultado de la suma de las transmisiones individuales que conectan los M_p modos transversales activos en el cable p y los M_q en el cable q . Por lo tanto, dada $T_{m(q) \rightarrow n(p)}$,

$$\mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E) = \sum_{n \in p} \sum_{m \in q} T_{m(q) \rightarrow n(p)}(E), \quad (3.4)$$

que puede depender de la energía. Con el mismo razonamiento, la corriente que viene de p se distribuye en las otras terminales. Por tanto

$$I_p = \frac{-2e}{h} \int dE \sum_q [\mathcal{T}_{p \rightarrow q}(E) f_p(E) - \mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E) f_q(E)]. \quad (3.5)$$

Esta es una expresión muy general que incluye la posibilidad de tener temperaturas y voltajes finitos. Los ingredientes principales son los coeficientes

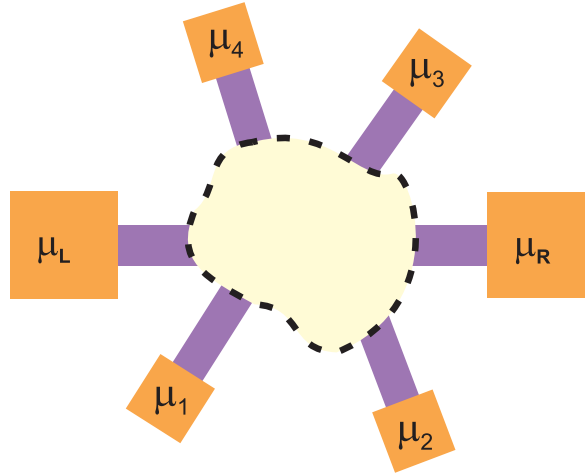


Figura 3.4: En sistemas mesoscópicos las terminales para la medición de tensión son tratados en pie de igualdad, como pistas con modos transversales. Los modos en las distintos cables se comunican a través de la estructura central.

de transmisión. El problema es determinar estas transmisiones que son características no del conductor aislado sino del conductor en presencia de los cables. En el caso de que haya sólo dos terminales (izquierda y derecha),

$$I_L = \frac{-2e}{h} \int dE [\mathcal{T}_{L \rightarrow R}(E) f_L(E) - \mathcal{T}_{R \rightarrow L}(E) f_R(E)], \quad (3.6)$$

que es la generalización de la Ec. (3.1).

Algunos límites particulares. Respuesta Lineal

El cálculo de la corriente es un **problema de no equilibrio**. La presencia de voltajes aplicados implica que los coeficientes de transmisión tienen que ser calculados con las distribuciones de electrones modificadas. De la Ec. (3.5) se puede obtener que $\sum_q [\mathcal{T}_{p \rightarrow q}(E) - \mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E)] = 0$ en el equilibrio, ya que $f_q^{eq}(E) = f_p^{eq}(E) = f^{eq}(E)$ y la corriente debe ser cero. Esto significa que, para p y q arbitrarios, $\mathcal{T}_{p \rightarrow q}^{eq}(E) = \mathcal{T}_{q \rightarrow p}^{eq}(E)$ en equilibrio. Fuera de equilibrio esta condición no se puede asegurar, pero es una suposición habitual. En este caso,

$$I_p = \frac{-2e}{h} \int dE \sum_q (f_p(E) - f_q(E)) \mathcal{T}_{p \rightarrow q}. \quad (3.7)$$

Para voltajes pequeños es apropiado trabajar en una aproximación de respuesta lineal. Si hay pequeñas variaciones respecto al equilibrio,

$$\begin{aligned} \delta I_p = I_p^0 &= \frac{-2e}{h} \int dE \sum_q [\delta \mathcal{T}_{p \rightarrow q}(E) f_p^{eq}(E) - \delta \mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E) f_q^{eq}(E)] \\ &+ [\mathcal{T}_{p \rightarrow q}^{eq}(E) \delta f_p(E) - \mathcal{T}_{q \rightarrow p}^{eq}(E) \delta f_q(E)], \end{aligned}$$

donde $\delta f_p \approx \left. \frac{\partial f_p}{\partial \mu_p} \right|_{eq} (-eV_p) = -\frac{\partial f^{eq}}{\partial E}(-eV_p)$. Si la variación de las transmisiones puede ser despreciada,

$$I_p^0 = \frac{2e^2}{h} \sum_q \int dE \left(-\frac{\partial f^{eq}}{\partial E} \right) \mathcal{T}_{p \rightarrow q}^{eq}(E) [V_p - V_q],$$

que puede ser expresado como

$$I_p^0 = \sum_q G_{q \rightarrow p} [V_p - V_q], \quad (3.8)$$

en términos de la conductancia

$$G_{q \rightarrow p} = \frac{2e^2}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f^{eq}}{\partial E} \right) \mathcal{T}_{p \rightarrow q}^{eq}(E). \quad (3.9)$$

Esta expresión es ampliamente utilizada. Es la **conductancia en respuesta lineal**. De hecho, el resultado es bastante general y sólo depende del cálculo de los coeficientes de transmisión. En el caso de que haya sólo dos cables,

$$G = \frac{2e^2}{h} \int dE \left(-\frac{\partial f^{eq}}{\partial E} \right) \mathcal{T}^{eq}(E),$$

y $I_L^0 = G[V_L - V_R]$.

Con el fin de resumir, hasta ahora se ha demostrado cómo calcular la corriente en un sistema de mesoscópico como el de la Fig. 3.4. Hay varias terminales, cada una conectada con un reservorio y a un conductor central que está caracterizado por coeficientes de transmisión que relacionan las corrientes en las diferentes terminales. Ellos describen la probabilidad de que la corriente fluya desde un cable a otro. El cálculo de la corriente a través del sistema se basa en la determinación de estos coeficientes: *i)* en un caso general (multi-terminal, voltaje finito, temperatura finita, efectos de no equilibrio no despreciables), la transmisión tiene que ser calculada para el problema de no equilibrio y la corriente se obtiene de la Ec. (3.5). *ii)* Cuando la transmisión se puede tomar como en equilibrio, la condición $\mathcal{T}_{p \rightarrow q}(E) = \mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E)$ puede ser utilizada. *iii)* A voltaje aplicado pequeño, la corriente se puede calcular utilizando la Ec. (3.8) y la conductancia utilizando la Ec. (3.9). *iv)* A temperaturas muy bajas, la derivada de la función de Fermi puede ser reemplazada por un delta de Dirac centrada en ϵ_F . Después de integrar en la Ec. (3.9), $G_{q \rightarrow p} = \frac{2e^2}{h} \mathcal{T}_{p \rightarrow q}^{eq}(\epsilon_F)$, que coincide con la expresión de la fórmula de Landauer (la Ec. (3.3)).

3.2. El lenguaje de las funciones de Green

El problema de transporte es ahora el cálculo de los coeficientes de transmisión. En términos de un problema de dispersión, estos coeficientes están

relacionados con los elementos de una matriz: la **matriz de dispersión** [Datta, 2003] [Bruus and Flensberg, 2004].

Una función de onda general que describe un electrón en el cable p es una combinación lineal de modos transversales

$$\Psi_p(x, y) = \sum_n \sum_{k>0} \chi_{pn}(y) [A_{pn}^+(k) e^{ikx} + A_{pn}^-(k) e^{-ikx}],$$

donde $A_{pn}^+(k)$ ($A_{pn}^-(k)$) es la amplitud de un electrón en el modo transversal n del cable p viajando desde el reservorio hacia el conductor (desde el conductor hacia el reservorio) con impulso k . Para un electrón de energía E , el vector de onda se puede determinar para cada modo transversal $\hbar k_n = \sqrt{2m(E - e_n)}$ y la función de onda resulta entonces

$$\Psi_{pE}(x, y) = \sum_n \chi_{pn}(y) [A_{pn}^+(E) e^{ik_n x} + A_{pn}^-(E) e^{-ik_n x}],$$

escrita en términos de coeficientes dependientes de la energía. Un sistema de coordenadas distinto x_p, y_p se puede asociar a cada cable. Todas las amplitudes “entrantes” $A_{pn}^+(E)$ (desde el punto de vista del conductor) se pueden juntar en un vector

$$\mathbf{a}(E) = (\dots (A_{pn}^+) \dots (A_{qm}^+) \dots),$$

y lo mismo se puede hacer con las amplitudes “salientes”,

$$\mathbf{b}(E) = (\dots (A_{pn}^-) \dots (A_{qm}^-) \dots).$$

Las amplitudes entrantes y salientes están relacionadas por la **matriz de dispersión**

$$\mathbf{b}(E) = \mathcal{S}(E) \mathbf{a}(E). \quad (3.10)$$

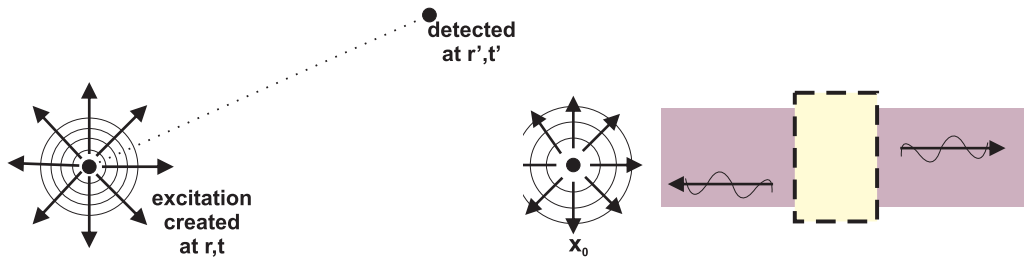


Figura 3.5: (izquierda) La inyección de un electrón en el sistema se puede considerar como la creación de una excitación en un punto r . Las funciones de Green se utilizan para conocer el efecto de esta excitación en un punto r' . (derecha) en presencia de un conductor, los coeficientes de transmisión se pueden obtener de las funciones de Green.

Como se ilustra en la Fig. 3.5, la inyección de un electrón en un cable puede ser considerada como una perturbación en el sistema creada en algún punto (x_0, y_0) . La medición del efecto de esta perturbación en (x, y) después

de la dispersión permite la determinación de los elementos de \mathcal{S} . El problema puede ser analizado en términos de **funciones de Green**. Es ventajoso introducir el lenguaje de funciones de Green, ya que puede ser empleado en situaciones muy generales. En lo que sigue: (i) el primer paso es definir las funciones de Green de una sola partícula y precisar el lenguaje a emplear ⁵. (ii) La segunda tarea consiste en expresar los elementos de la matriz de dispersión en términos de funciones de Green. Por último, (iii) una expresión para la corriente y la conductancia se puede escribir usando funciones de Green.

(i) Definición de funciones de Green de una partícula

Para los sistemas no interactuantes la función de Green de una partícula es un operador definido como

$$\hat{G}(E) = (E - \hat{H})^{-1}, \quad (3.11)$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano del sistema ⁶. Esta definición puede entenderse de la siguiente manera,

$$(E - \hat{H})\hat{G}(E) = \mathbb{I},$$

donde la introducción de $G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(E) = \langle \mathbf{r} | \hat{G}(E) | \mathbf{r}' \rangle$ con $\mathbf{r} = (x, y)$,

$$(E - H(\mathbf{r}))G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.12)$$

Esto es muy similar a la ecuación de Schrödinger estacionaria pero con una delta de Dirac como inhomogeneidad. La función de Green mide la amplitud en \mathbf{r} de un electrón con energía E inyectado en \mathbf{r}' .

La Ec. (3.12) puede resolverse muy fácilmente en el caso de un cable aislado. La delta separa el sistema en dos regiones (L y R) como se muestra en la Fig. 3.6. Si $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, las soluciones son

$$\begin{cases} G_E^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_n \chi_n(y) A_n^+(E) e^{ik_n|x-x'|}, \text{ para } x > x' \\ G_E^L(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_n \chi_n(y) A_n^-(E) e^{-ik_n|x-x'|}, \text{ para } x < x', \end{cases}$$

donde los coeficientes $A_n^+(E)$ y $A_n^-(E)$ se pueden determinar a partir de la continuidad de la solución $G_E^R(x', y) = G_E^L(x', y)$ y la discontinuidad de la

⁵Sólo un comentario en aras de claridad: (+) cuando el problema físico no implica interacciones entre las partículas (como repulsión de Coulomb) puede ser descrito en términos de operadores de una sola partícula y **de funciones de Green de una sola partícula**. Estas funciones de Green pueden ser relacionadas con el operador diferencial que resuelve la ecuación de Schrödinger estacionaria para inhomogeneidad deltiforme. (+) Cuando hay interacciones, hay una definición más general para **funciones de Green de muchos cuerpos**. (+) Las funciones de Green se pueden definir a temperatura cero o a temperatura finita. En este último caso, se las llama **funciones de Green de Matsubara o de tiempo imaginario**. El formalismo es ligeramente diferente debido a que los valores habituales de expectación tienen que ser reemplazados por los de ensamble. (+) Hay también una extensión del formalismo de la función de Green cuando el sistema está fuera de equilibrio. Este es el **formalismo de Keldish** que implica otras funciones de Green. Todas estas aparecen en esta tesis (véase el **Apéndice A**). Los detalles necesarios se darán oportunamente.

⁶La notación de sombrero se mantiene aquí para mayor claridad.

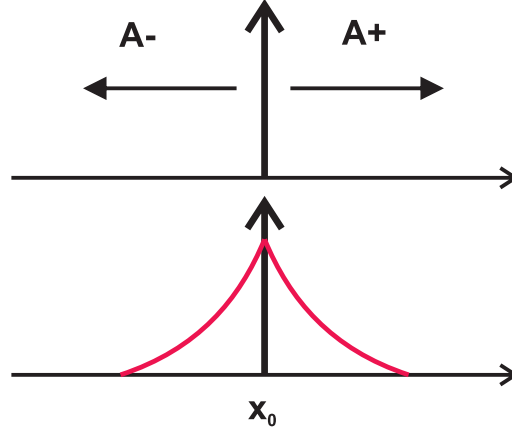


Figura 3.6: Convención empleada para encontrar la solución de la función de Green en el cable aislado.

derivada por la delta $\left. \frac{\partial G_E^R}{\partial x} \right|_{(x',y)} - \left. \frac{\partial G_E^L}{\partial x} \right|_{(x',y)} = \delta(y-y')2m/\hbar^2$. Como resultado, la función de Green para el cable aislado es

$$G_E^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{-i}{\hbar v_n} \chi_n(y) \chi_n^*(y') e^{ik_n|x-x'|}, \quad (3.13)$$

donde $v_n = \hbar k_n/m$ es la velocidad. Este resultado es la función de Green **retardada** $G_E^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ya que representa un proceso de crear primero la perturbación y luego medir su amplitud. También hay una función de Green **avanzada** $G_E^a(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ que corresponde a considerar ondas planas entrante hacia la delta (A^+ en la región de L y A^- en R). Ambas funciones se pueden encontrar cambiando directamente la energía E por $E \pm i\eta$ en la Ec. (3.11) o la Ec. (3.12) y tomando el límite de $\eta \rightarrow 0^+$. El signo más (menos) permite recuperar la función de Green retardada (avanzada).

(ii) La función de Green y la matriz de dispersión

El problema ahora es encontrar la función de Green para el sistema completo: los cables y el conductor central. Como se muestra en el panel derecho de la Fig. 3.5, en el caso en el que hay sólo dos cables: izquierdo y derecho, un electrón se inyecta en el cable izquierdo en $(x'_L, y'_L) = (0, y'_L)$ y se mide su amplitud en el cable ν en $(x_\nu, y_\nu) = (0, y_\nu)$. Si el cable estuviese aislado, la función de Green correspondería a $G_{L,E}^0$ dada por la Ec. (3.13) para una excitación creada en (x'_L, y'_L) . Como es habitual en problemas de dispersión, se puede considerar que “el detector” se coloca lejos de la región de dispersión y se pueden utilizar las soluciones asintóticas.

Si el detector se coloca en el cable **izquierdo**, hay dos contribuciones: una de ellas proviene de la propia excitación, es decir, la amplitud A^- en la inyección (véase la Fig. 3.6); y una segunda contribución que proviene de la parte reflejada. Si el detector se coloca en el cable **derecho**, la amplitud

detectada viene dada por la parte transmitida. Teniendo esto en cuenta,

$$G_{L \rightarrow \nu; E}^r(y_\nu, y'_L) = \sum_{n \in L} [\delta_{\nu, L} A_{Ln}^-(E) + A_{\nu n}^-(E)] \chi_n(y_\nu).$$

Las amplitudes salientes $A_{\nu n}^-(E)$ están relacionadas con las entrantes a través de la matriz de dispersión (véase la Ec. (3.10)), por lo tanto

$$G_{L \rightarrow \nu; E}^r(y_\nu, y'_L) = \sum_{n \in L} \left[\delta_{\nu, L} A_{Ln}^-(E) + \sum_{m \in \nu} \mathcal{S}_{nm} A_{Lm}^+(E) \right] \chi_n(y_\nu),$$

y para las soluciones asintóticas, los coeficientes son conocidos: $A_{Ln}^+(E) = A_{Ln}^-(E) = \frac{-i}{\hbar v_n} \chi_n^*(y'_L)$ luego

$$G_{L \rightarrow \nu; E}^r(y_\nu, y'_L) = \sum_{n \in L} \left[\frac{-i}{\hbar v_n} \delta_{\nu, L} \chi_n^*(y'_L) + \sum_{m \in \nu} \frac{-i}{\hbar v_m} \mathcal{S}_{nm} \chi_m^*(y'_L) \right] \chi_n(y_\nu).$$

Esta es la función de Green de una sola partícula de los cables y el conductor. Los coeficientes de la matriz de dispersión se pueden obtener usando la ortogonalidad de los modos transversales

$$\boxed{\mathcal{S}_{r(L) \rightarrow s(\nu)} = -\delta_{\nu, L} + i\hbar v_s \int dy'_L \int dy_\nu \chi_s(y'_L) \chi_r^*(y_\nu) G_{L \rightarrow \nu; E}^r(y_\nu, y'_L).} \quad (3.14)$$

Esta expresión es importante porque se refiere al cálculo de la matriz de dispersión a partir del conocimiento de las funciones de Green que provienen de la solución de la Ec. (3.12). En otras palabras, las propiedades de transporte se pueden determinar calculando las funciones de Green [Fisher and Lee, 1981].

(iii) Propiedades de transporte en términos de funciones de Green

Las transmisiones $\mathcal{T}_{p \rightarrow q}$ en la Ec. (3.4) miden la probabilidad de que la corriente que fluye en el cable p pase por el cable q . Pueden calcularse a partir de la matriz de dispersión escalada apropiadamente para convertir la amplitud de partícula en la amplitud de corriente. Definiendo \mathcal{S}' como

$$\mathcal{S}_{m(q) \rightarrow n(p)} = \sqrt{\frac{v_n}{v_m}} \mathcal{S}'_{m(q) \rightarrow n(p)}, \quad (3.15)$$

las transmisiones se pueden encontrar como

$$\mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E) = \sum_{n \in p} \sum_{m \in q} |\mathcal{S}'_{m(q) \rightarrow n(p)}(E)|^2. \quad (3.16)$$

Se puede demostrar que \mathcal{S}' es unitario con el fin de satisfacer la conservación de la corriente.

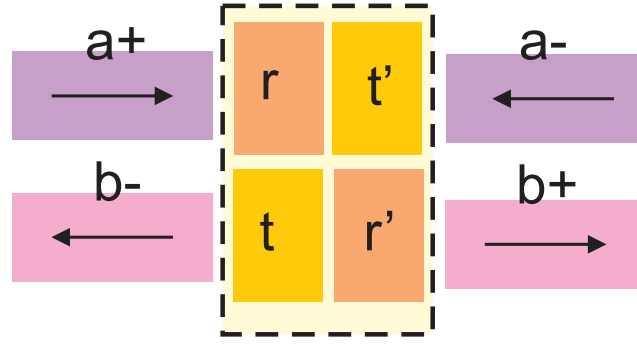


Figura 3.7: Con respecto a uno de los conductores (en este caso el cable de la izquierda), la matriz de dispersión se puede separar en bloques, $\mathbf{b} = \mathcal{S}\mathbf{a}$. Los electrones viajando hacia (desde) el conductor se etiquetan con \mathbf{a} (\mathbf{b}). Con respecto al cable de la izquierda, los electrones que se mueven de izquierda a derecha (de derecha a izquierda) se marcan con $+$ ($-$). Por lo tanto $\begin{pmatrix} b^- \\ b^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^+ \\ a^- \end{pmatrix}$, con los coeficientes de reflexión y transmisión r, r', t y t' .

En la práctica, si $q \neq p$ (que suele ser el caso), los únicos elementos de la matriz de dispersión que son necesarios son los que relacionan las amplitudes entrantes A^+ en el cable q con las amplitudes salientes A^- en el cable p . Para expresar los coeficientes de transmisión de una manera bastante simple voy a cambiar la notación un poco. En lugar de los diferentes sistemas de referencia, desde el punto de vista de uno de los reservorios (ver Fig. 3.7):

a^+ corresponde a la amplitud de un electrón **alejándose** del reservorio y

b^- **viajando hacia** el reservorio. Mientras que

a^- corresponde a la amplitud de un electrón **viajando hacia** el reservorio en otro cable y

b^+ **alejándose** en otro cable.

De acuerdo con esto, la matriz de dispersión se puede separar en bloques

$$\begin{pmatrix} b^- \\ b^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^+ \\ a^- \end{pmatrix},$$

donde desde el punto de vista del reservorio, todos los coeficientes que relacionan amplitudes a^+ con amplitudes transmitidas b^+ forman el bloque \mathbf{t} . Si $p \neq q$,

$$\mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E) = \text{Tr}(\mathbf{t}\mathbf{t}^\dagger)(E), \quad (3.17)$$

donde la traza es sobre los modos transversales. Esta expresión muestra que las propiedades de transporte (ver Ec. (3.5) y Ec. (3.9)) se pueden calcular a partir de la matriz \mathbf{t} . La expresión de Landauer de la Ec. (3.7) resulta

$$I_p = \frac{-2e}{h} \int dE \sum_q (f_p(E) - f_q(E)) \text{Tr}(\mathbf{t}\mathbf{t}^\dagger)(E), \quad (3.18)$$

donde $\mathbf{t} = \mathbf{t}_{p \rightarrow q}$.

Utilizando la Ec. (3.14) y el cambio de la Ec. (3.15) en la Ec. (3.16), los elementos de la matriz \mathbf{t} pueden expresarse en términos de las funciones de Green

$$\boxed{\mathcal{T}_{q \rightarrow p}(E) = \text{Tr}(\Gamma_q \hat{G}^r \Gamma_p \hat{G}^a)(E)}, \quad (3.19)$$

en donde

$$\langle \mathbf{r}' | \Gamma_q(E) | \mathbf{r} \rangle = \sum_{m \in q} \chi_m^*(y'_q) \chi_m(y_q) \hbar v_m.$$

Por consiguiente,

$$I_p = \frac{-2e}{h} \int dE \sum_q (f_p(E) - f_q(E)) \text{Tr}(\Gamma_q \hat{G}^r \Gamma_p \hat{G}^a)(E), \quad (3.20)$$

es la corriente en términos de las funciones de Green avanzada y retardada \hat{G}^a , \hat{G}^r y los acoplamientos Γ .

En este punto la imagen está completa. La corriente que fluye entre los diferentes reservorios se puede calcular en términos de las probabilidades de transmisión. Estas probabilidades se pueden obtener a partir de los elementos de una matriz, la matriz de dispersión. Esta matriz a su vez se puede calcular utilizando las funciones de Green. El punto clave es que, dado el Hamiltoniano del sistema, la tarea es encontrar las funciones de Green. En algunos casos, esto significa solamente invertir una matriz.

Observaciones importantes:

El problema del transporte en sistemas mesoscópicos puede ser descrito en términos de un Hamiltoniano H que incluye cables que llevan corriente termalizados con reservorios electrónicos conectados a un conductor central H_C . Hay importantes observaciones sobre: *a)* la validez de las expresiones que tienen que ser calculadas y *b)* qué tipo de procesos pueden ser tenidos en cuenta.

a) El problema es calcular la función de Green dado el Hamiltoniano. De acuerdo con la definición de la Ec. (3.11), y teniendo en cuenta, por ejemplo, cómo se encontró la solución para el cable aislado, parece que la temperatura y el voltaje no juegan ningún papel en absoluto. La observación es correcta. El problema que se resuelve para la función de Green es un problema de mecánica cuántica a temperatura cero en equilibrio. La temperatura y el voltaje aparecen en las distribuciones de Fermi cuando se calcula la corriente. En este sentido:

- La conexión entre las funciones de Green de una sola partícula definidos por la Ec. (3.11) y las transmisiones es válida cerca del equilibrio.
- El efecto de la temperatura y el voltaje se tiene en cuenta sólo a través de las funciones de distribución de Fermi en las integrales de energía.

b) Además, el sistema descrito por H_C puede ser bastante complejo: una molécula, un nanocable, un punto cuántico, por ejemplo. Lo que no es en absoluto obvio es ¿cómo sería posible incluir interacciones electrón-electrón o electrón-fonón dentro de este formalismo?:

- La definición de las funciones de Green dadas en la Ec. (3.11) es adecuada para problemas de una sola partícula. Las interacciones entre electrones y el acoplamiento a otros grados de libertad no pueden ser tratados dentro de este formalismo sin alguna modificación. Es necesario introducir una función de Green de muchos cuerpos o alguna aproximación al problema (por ejemplo, una aproximación de campo medio) para tener un problema efectivo de una sola partícula.
- No es válido para el tratamiento de los fenómenos dependientes del tiempo.
- La conexión entre la matriz de dispersión y la función de Green como se demostró es válida para sistemas no interactuantes.

En la siguiente sección, un enfoque general se presenta donde el problema de calcular las propiedades de transporte se trata como un problema de muchos cuerpos. La derivación sigue el trabajo de Meir y Wingreen [Meir and Wingreen, 1992]. Se obtienen expresiones similares para la corriente y la conductancia.

3.3. Un enfoque general para la corriente

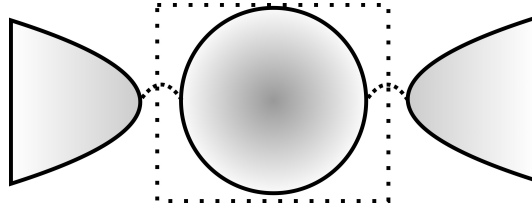


Figura 3.8: Esquema general para el problema de transporte. El sistema está formado por un conductor central y dos reservorios de electrones que están acoplados. Los reservorios pueden ser descritos como las bandas de conducción en un metal y tienen una temperatura y un potencial químico bien definidos. Los electrones de conducción están en equilibrio con estos reservorios. El transporte es posible debido a que los electrones pueden entrar en el conductor, ocupando los estados disponibles, o salir desde los estados localizados de la región central hacia los electrodos.

Con el fin de calcular las propiedades de transporte, el sistema completo se puede descomponer en diferentes partes como se ilustra en la Fig. 3.8. El Hamiltoniano para este problema es

$$H = H_L + H_R + H_C + H_{MIX}, \quad (3.21)$$

donde H_ν representa los cables a izquierda ($\nu = L$) y derecha ($\nu = R$), H_C es el Hamiltoniano que describe el conductor central y H_{MIX} representa el acoplamiento entre las tres partes.

La idea es tratar este problema como un problema de muchos cuerpos. Una expresión para el Hamiltoniano se puede dar en términos de operadores de creación y destrucción. Los cables conectados a los reservorios se describen como los electrones en un metal con un Hamiltoniano no interactuante

$$H_\nu = \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma}, \quad (3.22)$$

donde $\epsilon_{k,\nu,\sigma} = \epsilon_{k,\sigma} - \mu_\nu$. Este sería el mismo que antes para cada modo transversal. Los operadores $c_{k\nu\sigma}^\dagger$ ($c_{k\nu\sigma}$) representan la creación (destrucción) de un electrón con momento k y espín σ en el cable ν .

El conductor central puede ser descrito en términos de un conjunto completo y ortonormal de operadores $\{d_n^\dagger, d_n\}$,

$$H_C = H_C(\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}), \quad (3.23)$$

y puede incluir interacciones (es decir, términos de dos cuerpos).

El Hamiltoniano para el acoplamiento es

$$H_{MIX} = \sum_{k\sigma\nu n} \left(V_{k\nu n\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n + H.c. \right), \quad (3.24)$$

donde $V_{k\nu n\sigma}$ es el elemento de la matriz de *tunneling* de los electrones en el cable ν con momento k y espín σ para entrar en el conductor central en el estado localizado n .

Usando las Ecs. (3.22), (3.23) y (3.24), el Hamiltoniano del sistema es

$$H = \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma} + H_C(\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}) + \sum_{k\sigma\nu n} \left(V_{k\nu n\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n + H.c. \right). \quad (3.25)$$

La corriente

La corriente que fluye de izquierda a derecha se puede calcular a partir de la ecuación de continuidad

$$I_L = -e \langle \dot{N}_L \rangle,$$

donde $N_L = \sum_{k,\sigma} c_{kL\sigma}^\dagger c_{kL\sigma}$ es el número total de electrones en el cable izquierdo y

$$\dot{N}_L = -\frac{i}{\hbar} [N_L, H].$$

Esto asume que los operadores están en la representación de Heisenberg. Es fácil comprobar que $[N_L, H_L] = [N_L, H_R] = [N_L, H_C] = 0$ y, por lo tanto, la única contribución al conmutador es

$$\begin{aligned} \dot{N}_L &= -\frac{i}{\hbar} [N_L, H_{MIX}] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} c_{kL\sigma}^\dagger d_n - V_{kLn\sigma}^* d_n^\dagger c_{kL\sigma} \right), \end{aligned}$$

y la corriente resulta

$$I_L = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} \langle c_{kL\sigma}^\dagger d_n \rangle - V_{kLn\sigma}^* \langle d_n^\dagger c_{kL\sigma} \rangle \right). \quad (3.26)$$

Está expresada en términos de los valores de expectación: $\langle c_{kL\sigma}^\dagger d_n \rangle$ y $\langle d_n^\dagger c_{kL\sigma} \rangle$. Nótese la similitud con la Ec. (3.5). Más tarde, esto se hará más claro.

Funciones de Green de no-equilibrio

Estos valores de expectación están relacionados con algunas funciones de Green especiales que son adecuadas para los problemas de no equilibrio (ver Sec. A.6 en el **Apéndice A**). Se llaman **funciones de Green menores** y se definen como

$$G_{ij,\sigma}^<(t, t') = i \langle d_{j\sigma}^\dagger(t') d_{i\sigma}(t) \rangle,$$

donde los operadores están en la representación de Heisenberg y $\langle \rangle$ debe entenderse como un valor medio en el ensamble gran canónico. En el régimen estacionario, la función de Green sólo depende de la diferencia de $t - t'$. En este caso, mediante la introducción de

$$G_{n,kL\sigma}^<(t - t') = i \langle c_{kL\sigma}^\dagger(t') d_n(t) \rangle, \quad (3.27)$$

$$G_{kL\sigma,n}^<(t - t') = i \langle d_n^\dagger(t) c_{kL\sigma}(t') \rangle, \quad (3.28)$$

la corriente de la Ec. (3.26) se puede expresar como

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} G_{n,kL\sigma}^<(0) - V_{kLn\sigma}^* G_{kL\sigma,n}^<(0) \right).$$

La aplicación de una transformada de Fourier a esta expresión resulta

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} G_{n,kL\sigma}^<(\omega) - V_{kLn\sigma}^* G_{kL\sigma,n}^<(\omega) \right), \quad (3.29)$$

que es la corriente escrita en términos de funciones de Green de no equilibrio. La tarea consiste en determinar estas funciones de Green.

Un enfoque basado en dibujos

Una expresión muy útil para la corriente puede obtenerse si las funciones de Green $G_{kL\sigma,n}^<$ y $G_{n,kL\sigma}^<$ se ponen en términos de las propiedades del conductor central, los reservorios y el acoplamiento a los conductores. Para ello, el Hamiltoniano se divide como $H = H_0 + H_1$ donde

$$H_0 = \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma} + H_C(\{d_n^\dagger\}, \{d_n\})$$

$$H_1 = \sum_{k\sigma\nu n} \left(V_{k\nu n\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n + H.c. \right),$$

y la idea es tratar H_1 como una perturbación. En ausencia de mezcla, los reservorios y el conductor central descritos por H_0 están desconectados. Los autoestados y autoenergías del sistema aislado se consideran conocidos⁷. La idea es utilizar la teoría de perturbaciones para averiguar el efecto de acoplamiento de estas partes con H_1 .

En lugar de una derivación formal voy a hacer la expansión perturbativa en términos de diagramas⁸. La estructura de la función de Green (de la Ec. (3.28))

$$\langle \Psi | d_n^\dagger(0) \leftarrow c_{kL\sigma}(t) | \Psi \rangle,$$

puede interpretarse como: tomar al estado $|\Psi\rangle$ del sistema completo $H_0 + H_1$ en el momento $t' = t$, destruir un electrón con impulso k y espín σ en el cable izquierdo y dejar que el estado resultante evolucione en el tiempo hasta $t' = 0$. Crear un electrón dentro del conductor central en el nivel n y proyectar el resultado en el estado inicial. La representación diagramática de esta función de Green se muestra en la Fig. 3.9 y hace más claro por qué en este contexto las funciones de Green también son conocidas como **propagadores**⁹.

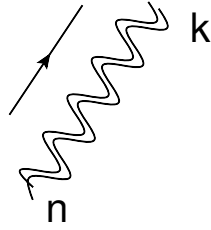


Figura 3.9: Representación diagramática de la función de Green definida por la Ec. (3.28).

El cálculo de estos valores de expectación en el conjunto de los estados exactos del Hamiltoniano completo $\{|\Psi\rangle\}$ es difícil debido a que estos estados no se conocen. Si se les conociese, el problema sería sencillo. La idea de la teoría de perturbaciones es que esta función de Green se puede calcular utilizando los estados de H_0 . En lugar de una propagación directa desde $t \rightarrow 0$, la evolución se produce teniendo en cuenta todos los posibles “eventos de dispersión” en tiempos intermedios $t > t_1, \dots, t_n > 0$. Estos “procesos de dispersión” están dados por H_1 . La evolución entre estos eventos está determinada por el Hamiltoniano no perturbado H_0 . Todos los posibles procesos intermedios deben ser tenidos en cuenta.

Esto funciona en el siguiente sentido. Si no hay ningún evento de dispersión, la función de Green es

$$\langle \Psi_0 | d_n^\dagger(0) \leftarrow c_{kL\sigma}(t) | \Psi_0 \rangle,$$

donde $|\Psi_0\rangle$ es un estado propio de H_0 . Esto se puede representar como en la Fig. 3.10.

⁷Aunque esto puede no ser necesariamente el caso de los sistemas interactuantes.

⁸El resultado que se encuentra es el mismo que el de la ecuación de movimiento.

⁹Todos los diagramas de esta tesis fueron realizados con el programa libre JaxoDraw para graficar diagramas de Feynman compatibles con Latex [Binosi and Theussl, 2004]

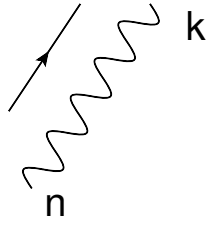


Figura 3.10: Representación diagramática de la función de Green no perturbada.

La función de Green exacta se puede calcular con la adición de todas las posibilidades: un evento de dispersión, dos eventos de dispersión, etc., como se muestra en la Fig. 3.11.

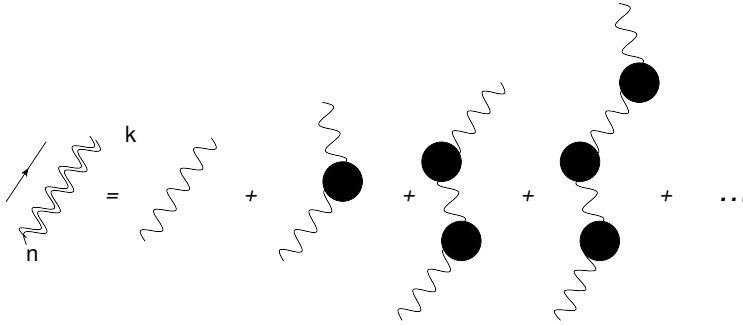


Figura 3.11: Representación diagramática del desarrollo perturbativo para la función de Green.

Los eventos de dispersión descritos por H_1 son saltos desde $k \rightarrow n$ y lo opuesto $n \rightarrow k$. Por ejemplo, un proceso intermedio en t_1 puede ser

$$\langle \Psi_0 | d_n^\dagger(0) \leftarrow d_m(t_1) c_{k'\nu\sigma'}^\dagger(t_1) \leftarrow c_{kL\sigma}(t) | \Psi_0 \rangle,$$

y hay un teorema por Wick [Wick, 1950], que establece que **si los operadores están debidamente ordenados temporalmente**, este valor de expectación es equivalente al producto

$$\langle \Psi_0 | d_n^\dagger(0) \leftarrow d_m(t_1) | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | c_{k'\nu\sigma'}^\dagger(t_1) \leftarrow c_{kL\sigma}(t) | \Psi_0 \rangle.$$

La ventaja es que los valores de expectación:

$$\langle \Psi_0 | d_n^\dagger(0) d_m(t_1) | \Psi_0 \rangle \text{ y } \langle \Psi_0 | c_{k'\nu\sigma'}^\dagger(t_1) c_{kL\sigma}(t) | \Psi_0 \rangle,$$

son las definiciones de las funciones de Green **no perturbadas** para el conductor central y los electrones de conducción, respectivamente. En principio, se las conoce. Estas funciones de Green no perturbadas se representan como flechas en la Fig. 3.12(a). Los propagadores del conductor central $\langle \Psi_0 | d_n^\dagger(0) d_m(t_1) | \Psi_0 \rangle$ se representan con una flecha de línea continua y el propagador del electrón de conducción $\langle \Psi_0 | c_{k'\nu\sigma'}^\dagger(t_1) c_{kL\sigma}(t) | \Psi_0 \rangle$ con una flecha de línea a trazos.

Los “eventos de dispersión” examinados pueden ser representados como en la Fig. 3.12(b). Se pueden interpretar como procesos en los que un electrón que ocupa un estado en el conductor central tunelea a la banda de conducción. Este diagrama se llama **vértice** y es la base de la expansión diagramática. Representa los procesos considerados por H_1 , en este caso por

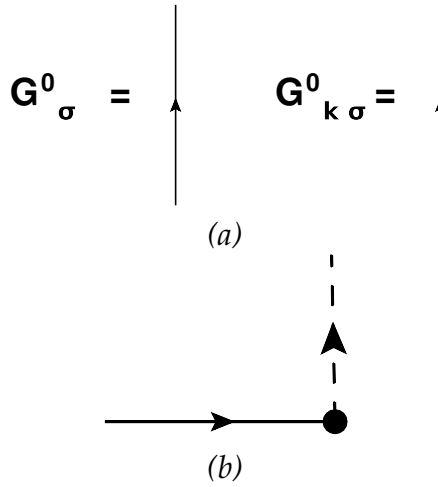


Figura 3.12: (a) Funciones de Green no perturbadas para los electrones de conducción (flecha discontinua) y para el conductor central (flecha continua) en el contexto del Hamiltoniano de la Ec. (3.25). (b) Representación diagramática del “evento de dispersión”. Un electrón es destruido en el conductor central y creado en la banda de conducción. Esto es llamado un **vértice** y es la base de la expansión diagramática. Corresponde al proceso descrito por H_{MIX} en la Ec. (3.25). El diagrama del vértice está acompañado por una constante de acoplamiento $V_{k'\nu\sigma',n}$.

H_{MIX} en la Ec. (3.25). Este vértice se acompaña con una constante de acoplamiento $V_{k'\nu\sigma',n}$.

La expansión diagramática para la función de Green de la Ec. (3.28) usando este vértice se muestra en la Fig. 3.13.

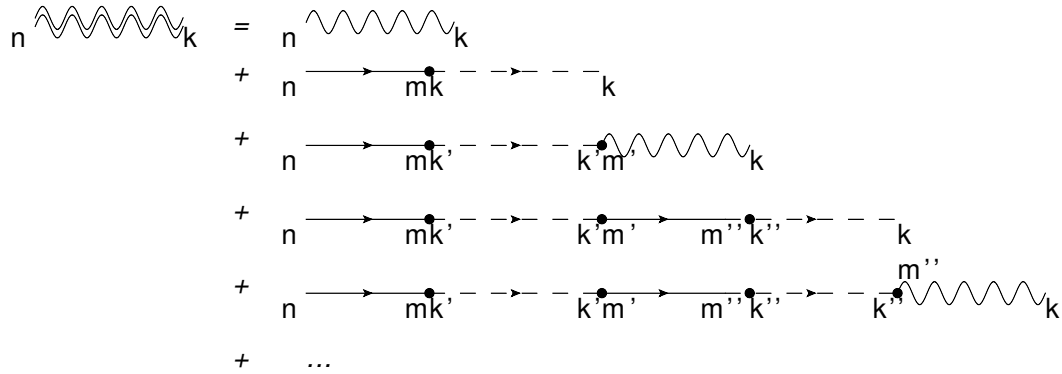


Figura 3.13: Expansión diagramática de la función de Green de la Ec. (3.28) representada con una doble línea ondulada.

Debe tenerse en cuenta que todos los valores de expectación $\langle \Psi_0 | d_n^\dagger(0) c_{kL\sigma}(t) | \Psi_0 \rangle$, calculados con estados propios de H_0 son **cero** ya que los cables y el conductor están desconectados. Hay una estructura que se repite en la expansión diagramática. Haciendo uso de este hecho, es posible expresar la serie perturbativa de una forma más compacta como se muestra en la Fig. 3.14.

En esta expresión, la expansión se oculta en el propagador de línea doble que corresponde a la función de Green **perturbada** del conductor, es decir, calculada con los estados de $H_0 + H_1$. Es el propagador vestido, es decir, el propagador del conductor calculado en la presencia de los cables.

Figura 3.14: Ecuación de Dyson para la función de Green de la Ec. (3.28). La función de Green perturbada para el conductor está representada por una doble línea continua.

En resumen, esta expresión diagramática significa que la función de Green que conecta los cables y el conductor central se puede calcular como un producto en frecuencia (una convolución en el tiempo) de la función de Green no perturbada de los electrones de conducción y la función de Green vestida del conductor central. Esto está multiplicado por un factor $V_{k'\nu\sigma',n}$ ya que sólo hay un vértice.

Perturbaciones fuera del equilibrio

Hay un punto muy importante que es digno de ser discutido. Las funciones de Green que se necesitan son funciones de Green de no equilibrio. La extensión de la teoría de perturbaciones no es inmediata. La razón es que fuera de equilibrio, el orden de los operadores en el tiempo no está bien definido.

En equilibrio, la teoría de perturbaciones se apoya en el hecho que los estados perturbados del sistema (estados $|\Psi\rangle$ de $H = H_0 + H_1$) pueden ser relacionados con los estados no perturbados $|\Psi_0\rangle$ si las perturbaciones se encienden adiabáticamente [Mahan, 2000]. Esta evolución adiabática asume que en tiempos muy anteriores $\rightarrow -\infty$, las perturbaciones están **apagadas** y el sistema está en un estado $|\Psi_0\rangle$. Durante la evolución temporal de este estado hasta tiempo t' , las perturbaciones son **encendidas** adiabáticamente y al final, el estado es un estado propio del Hamiltoniano total [Gellmann and Low, 1951]. Esta evolución se realiza con un operador llamado $S(t_2, t_1)$,

$$\langle\Psi|d_n^\dagger(t)c_{kL\sigma}(t')|\Psi\rangle = \langle\Psi|d_n^\dagger(t)c_{kL\sigma}(t')S(t', -\infty)|\Psi_0\rangle.$$

En esta expresión, está implícito que t' es **anterior a t** . La evolución en los tiempos intermedios se puede hacer con H_0 utilizando los operadores en la representación de interacción (ver Sec. A.1 en el **Apéndice A**)

$$\langle\Psi|d_n^\dagger(t)c_{kL\sigma}(t')|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{d}_n^\dagger(t)S(t, t')\hat{c}_{kL\sigma}(t')S(t', -\infty)|\Psi_0\rangle.$$

Si hay otra evolución desde t a tiempos posteriores muy grandes $\rightarrow \infty$ en los que las perturbaciones son **apagadas** nuevamente, a menos de una fase, el estado final también corresponde a $|\Psi_0\rangle$,

$$\langle\Psi|d_n^\dagger(t)c_{kL\sigma}(t')|\Psi\rangle = \frac{\langle\Psi_0|}{S(+\infty, -\infty)}S(+\infty, t)\hat{d}_n^\dagger(t)S(t, t')\hat{c}_{kL\sigma}(t')S(t', -\infty)|\Psi_0\rangle.$$

Si todos los operadores están ordenados apropiadamente, que puede garantizarse usando el operador de ordenamiento temporal T ,

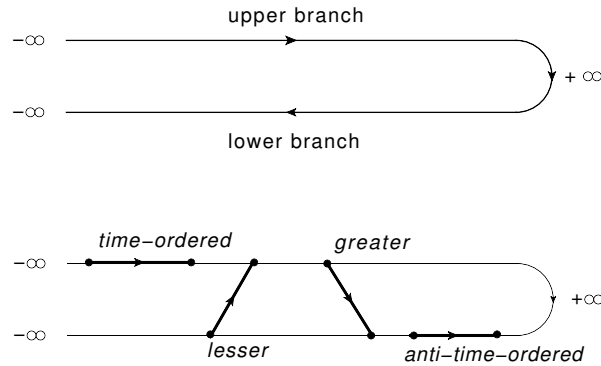
$$\langle \Psi | d_n^\dagger(t) c_{kL\sigma}(t') | \Psi \rangle = \frac{\langle \Psi_0 | TS(+\infty, -\infty) \hat{d}_n^\dagger(t) \hat{c}_{kL\sigma}(t') | \Psi_0 \rangle}{S(+\infty, -\infty)},$$

la función de Green se puede encontrar mediante el desarrollo en serie de S (ver Sec. A.4).

En este contexto de transporte (y fuera de equilibrio en general) el panorama es completamente diferente. Si las perturbaciones se encuentran **apagadas** a tiempos muy anteriores $\rightarrow -\infty$, esto significa que los reservorios y el conductor central están inicialmente **desconectados**. No hay corriente. Cuando las perturbaciones se encienden adiabáticamente, dado que hay un desequilibrio de potencial químico, se establece una corriente. Este es un proceso **irreversible**. Con la corriente fluyendo en el régimen estacionario, el estado inicial no se puede recuperar con una evolución a $t \rightarrow \infty$, incluso si las perturbaciones vuelven a apagarse. Hay una “dirección en el tiempo”.

Para evitar este problema, el formalismo es un poco más complicado porque la evolución en el tiempo se realiza en un **contorno temporal** (ver Sec. A.6). Este contorno se muestra en la Fig. 3.15 y se llama **contorno de Keldysh** [Keldysh, 1964].

Figura 3.15: (arriba) Contorno de Keldysh. La evolución en el tiempo se realiza siguiendo una trayectoria curva. Desde $-\infty \rightarrow +\infty$ y luego de vuelta. El estado inicial y final son los mismos. (abajo) Los operadores de creación y destrucción actúan a lo largo del contorno dando lugar a cuatro posibles funciones de Green de no equilibrio llamadas ordenada temporal, menor, mayor y anti-ordenada temporal.



La evolución se hace desde $-\infty \rightarrow \infty$ en la **rama superior** y luego de vuelta en la **rama inferior** siguiendo una trayectoria curva. De esta manera, la acción de los operadores puede ser claramente ordenada en el tiempo usando un operador especial de ordenamiento temporal en el contorno T_C y además, el estado inicial y final son los mismos. Hay un único estado de referencia, que está bien definido y corresponde a la situación **antes de conectar los reservorios y el conductor central**¹⁰

$$\langle \Psi | d_n^\dagger(t) c_{kL\sigma}(t') | \Psi \rangle = \frac{\langle \Psi_0 | T_C S_C(-\infty, -\infty) \hat{d}_n^\dagger(t) \hat{c}_{kL\sigma}(t') | \Psi_0 \rangle}{S_C(-\infty, -\infty)},$$

¹⁰Esto permite trazar sobre estados conocidos y usar el teorema de Wick.

donde $S_C(s_1, s_2)$ es el operador S definido en el contorno [Mahan, 2000]. Como se muestra en la Fig. 3.15, hay varios propagadores que se pueden definir en el contorno. La función de Green menor es uno de ellos.

La expresión para la corriente

La expresión diagramática que se muestra en la Fig. 3.14 puede escribirse como

$$G_{kL\sigma,n} \sim G_{n,m} g_{kL\sigma},$$

donde $G_{n,m}$ es la función de Green vestida del conductor central y $g_{kL\sigma}$ es la función de Green no perturbada de los electrones de conducción. Los diagramas pueden ser traducidos al contorno como se muestra en la Fig. 3.16. El vértice se puede colocar en la rama superior o en la rama inferior del contorno y de acuerdo con esto, la expresión diagramática fuera de equilibrio es más complicada.

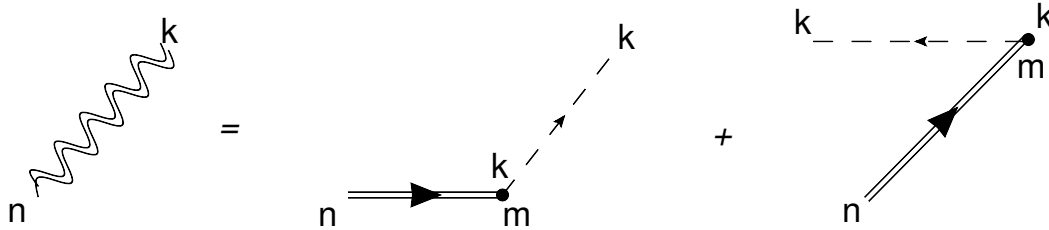


Figura 3.16: Desarrollo diagramático en el contorno Keldysh de la función de Green menor definida por la Ec. (3.28).

Hay una propiedad muy útil probada por Langreth [Langreth, 1967] con respecto a la componente menor de un producto de los operadores

$$G^< = (AB)^< = A^a B^< + A^< B^r,$$

donde $A^{a,r}$ son las funciones de Green avanzadas y retardadas. Esto se aplica directamente al diagrama en la Fig. 3.14,

$$G_{kL\sigma,n}^< \sim (G_{n,m} g_{kL\sigma})^< = G_{n,m}^a g_{kL\sigma}^< + G_{n,m}^< g_{kL\sigma}^r,$$

donde $g_{kL\sigma}^<$ ($g_{kL\sigma}^r$) es la función de Green menor (retardada) no perturbada de los electrones de conducción en los reservorios; mientras que $G_{n,m}^<$ ($G_{n,m}^a$) es la función de Green menor (avanzada) vestida del conductor central. Esta es una forma diferente de escribir una expresión analítica para los diagramas de la Fig. 3.16 (ver Sec. A.7 en el **Apéndice A** para una forma alternativa).

La otra función de Green menor que es necesaria para calcular la corriente se puede obtener de forma análoga,

$$G_{n,kL\sigma}^< \sim (g_{kL\sigma} G_{m,n})^< = g_{kL\sigma}^a G_{m,n}^< + g_{kL\sigma}^< G_{m,n}^r.$$

Estas expresiones pueden ser insertadas en la Ec. (3.29) para encontrar la corriente

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{k,\sigma,n,m} V_{kLn\sigma} V_{kLm\sigma}^* (g_{kL\sigma}^< [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a] - G_{n,m}^< [g_{kL\sigma}^r - g_{kL\sigma}^a]) .$$

Esta expresión se ve muy complicada, pero la información de los reservorios y las propiedades del conductor central se han separado. La función de Green menor está relacionada con la ocupación de un estado y las funciones de Green avanzadas y retardadas están relacionadas con la densidad de estados. Para los electrones de conducción el cálculo tiene que ser realizado con H_0 y el resultado se puede expresar en términos de las propiedades de los reservorios:

$$\begin{aligned} g_{kL\sigma}^<(\omega) &= 2\pi i f_L(\omega) \delta(\omega - \epsilon_k), \\ (g_{kL\sigma}^r - g_{kL\sigma}^a)(\omega) &= -2\pi i \rho_{kL\sigma}(\omega) = -2\pi i \delta(\omega - \epsilon_k), \end{aligned}$$

donde $f_L(\omega)$ es la distribución de Fermi del reservorio izquierdo. Teniendo en cuenta que $V_{kLn\sigma} V_{kLm\sigma}^* = V_{Ln\sigma}(\omega) V_{Lm\sigma}^*(\omega) \delta(\omega - \epsilon_k)$, la suma sobre k se puede realizar para dar la densidad de estados por espín en el cable izquierdo, $\rho_{L\sigma}$, por ende

$$I_L = \frac{ei}{\hbar} \int d\omega \sum_{\sigma,n,m} V_{Ln\sigma}(\omega) V_{Lm\sigma}^*(\omega) \rho_{L\sigma}(\omega) (f_L(\omega) [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a](\omega) + G_{n,m}^<(\omega)) .$$

Introduciendo la **matriz de hibridación** Γ^ν que caracteriza el acoplamiento entre el cable ν y el conductor central,

$$\Gamma_{n,m}^\nu(\omega) = 2\pi V_{\nu n\sigma}(\omega) V_{\nu m\sigma}^*(\omega) \rho_{\nu\sigma}(\omega), \quad (3.30)$$

la corriente resulta,

$$I_L = \frac{ei}{\hbar} \int d\omega \sum_{n,m} \Gamma_{n,m}^L(\omega) (f_L(\omega) [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a](\omega) + G_{n,m}^<(\omega)), \quad (3.31)$$

que es un resultado muy importante. Es la expresión para calcular la corriente a través de una región interactuante. La corriente está determinada por las propiedades del conductor central contenida en las funciones de Green $G_{n,m}^{r,a,<}$, por las propiedades de los reservorios representadas por las funciones de distribución de Fermi y por el acoplamiento a los reservorios a través de la matriz Γ^ν . Es muy importante que las funciones de Green del conductor central son las **vestidas**. Tienen que ser computadas en la presencia de los cables!

A partir de la conservación de la corriente, $I_L = -I_R$ y por lo tanto $I = \frac{I_L - I_R}{2}$, luego

$$\begin{aligned} I &= \frac{ei}{2\hbar} \int d\omega \sum_{n,m} \{ [\Gamma_{n,m}^L(\omega) f_L(\omega) - \Gamma_{n,m}^R(\omega) f_R(\omega)] [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a](\omega) \\ &+ [\Gamma_{n,m}^L(\omega) - \Gamma_{n,m}^R(\omega)] G_{n,m}^<(\omega) \} . \end{aligned} \quad (3.32)$$

No hay corriente en equilibrio

Si los potenciales electroquímicos son los mismos en el reservorio de la izquierda y derecha, $\mu_L = \mu_R = \mu_{eq}$ no debe haber corriente. Se puede demostrar que si $f_L(\omega) = f_R(\omega) = f_{eq}(\omega)$, $G^< = -f_{eq}(G^r - G^a)$ e $I = 0$.

Acoplamientos proporcionales

En muchos sistemas experimentales, los acoplamientos a los reservorios izquierdo y derecho (a menudo llamados fuente y sumidero) son muy similares ¹¹. Si los acoplamientos son proporcionales $\Gamma_L(\omega) = \alpha \Gamma_R(\omega)$, la expresión para la corriente puede ser simplificada. De hecho, dado que $I = I_L = -I_R$, la identidad $I = xI_L - (1-x)I_R$ vale para x arbitrario. Con la elección apropiada de $x = (1+\alpha)^{-1}$,

$$I = (1+\alpha)^{-1} [I_L - \alpha I_R],$$

por tanto

$$I \sim \frac{\Gamma_{n,m}^L \Gamma_{n,m}^R}{\Gamma_{n,m}^L + \Gamma_{n,m}^R}(\omega) [f_L(\omega) - f_R(\omega)] [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a](\omega),$$

donde con la introducción del **acoplamiento efectivo** $\Gamma_{m,n} = \frac{\Gamma_{n,m}^L \Gamma_{n,m}^R}{\Gamma_{n,m}^L + \Gamma_{n,m}^R}$,

$$I = \frac{ei}{h} \int d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] Tr \{ \Gamma(\omega) [G^r - G^a](\omega) \}. \quad (3.33)$$

La traza es sobre los niveles de energía del conductor central (incluyendo el índice de espín).

Esta expresión es muy útil ya que ahora la dependencia explícita sobre la función de Green menor se ha ido. Las funciones de Green retardadas y avanzadas están relacionadas con la densidad de estados del conductor central

$$\rho_{m,n}(\omega) = -\frac{G_{m,n}^r - G_{m,n}^a}{2\pi i},$$

por ende

$$I = \frac{e2\pi}{h} \int d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] Tr \{ \Gamma(\omega) \rho(\omega) \}. \quad (3.34)$$

Otra expresión sencilla se puede derivar para acoplamientos proporcionales y voltajes pequeños. En este caso, la diferencia $f_L(\omega) - f_R(\omega) \approx -\frac{\partial f}{\partial \omega}|_{eq} eV_{bias}$ e

$$I \approx \frac{e^2 2\pi V_{bias}}{h} \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right)_{eq} Tr \{ \Gamma(\omega) \rho^{eq}(\omega) \}, \quad (3.35)$$

¹¹aunque no siempre es el caso. Véase, por ejemplo el **Capítulo 5**

donde $\rho^{eq}(\omega)$ es ahora la densidad de estados en equilibrio. A partir de esta expresión, la **conductancia en respuesta lineal** es

$$G \approx \frac{e^2}{h} 2\pi \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right)_{eq} Tr \{ \Gamma(\omega) \rho^{eq}(\omega) \}. \quad (3.36)$$

En general, la conductancia a voltaje cero tiene que ser obtenida a partir de la conductancia diferencial dI/dV_{bias} evaluada en $V_{bias} = 0$.

Conductores no interactuantes

Como último comentario en esta introducción, cuando el conductor central no es interactuante se puede demostrar que la expresión de la corriente (Ec. (3.32)) se reduce a la fórmula de Landauer (ver Sec. A.8 para los detalles).

Para un Hamiltoniano no interactuante

$$H_C = \sum_n E_n d_n^\dagger d_n.$$

En general, la función de Green satisface la ecuación Dyson

$$G_{n,m} = g_{n,m} + \sum_{m',m} g_{n,m'} \Sigma_{m',m} G_{m,m},$$

donde $\Sigma_{m',m}$ es la auto-energía. En particular,

$$G_{n,m}^{r,a} = g_{n,m}^{r,a} + \sum_{m',m} g_{n,m'}^{r,a} \Sigma_{m',m}^{r,a} G_{m,m}^{r,a},$$

y

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{G}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a.$$

Este último resultado se demuestra en la Sec. A.8. La auto-energía se puede calcular con la teoría de perturbaciones. El caso no interactuante es bastante fácil (ver Sec. A.3). La expansión diagramática se muestra en la Fig. 3.17.

$$\Rightarrow = \rightarrow + \rightarrow \cdot \rightarrow + \rightarrow \cdot \rightarrow \cdot \rightarrow + \rightarrow \cdot \rightarrow \cdot \rightarrow \cdot \rightarrow + \dots$$

Figura 3.17: Desarrollo diagramático en el caso no interactuante, sólo hay un acoplamiento con la banda de conducción. Los diagramas representan procesos en los que un electrón salta hacia la banda de conducción y vuelve. Los diferentes órdenes corresponden al número de vértices.

Los procesos representados por los diagramas corresponden a los posibles saltos de los electrones en los estados localizados del conductor a la banda de conducción y lo opuesto. El orden de cada contribución en la expansión perturbativa está dado por el número de vértices. Sólo hay diagramas con un número par de vértices y éstos están multiplicados por un factor

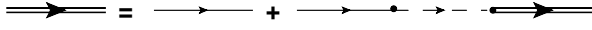


Figura 3.18: Ecuación de Dyson en el caso no interactuante.

V^{2n} . Como se muestra en la Fig. 3.18, es posible expresar la expansión diagramática en forma de una ecuación de Dyson.

De la traducción de los diagramas es posible escribir la expresión analítica para las auto-energías retardadas y avanzadas

$$\Sigma_{m',m}^{r,a}(\omega) = \Sigma_{m',m}^{\text{Rr},a} \mp \frac{i}{2} \sum_{\nu} \Gamma_{m'm}^{\nu},$$

y para las auto-energías menores y mayores

$$\begin{aligned} \Sigma_{m',m}^{<}(\omega) &= i \sum_{\nu} \Gamma_{m',m}^{\nu} f_{\nu}(\omega), \\ \Sigma_{m',m}^{>}(\omega) &= -i \sum_{\nu} \Gamma_{m',m}^{\nu} (1 - f_{\nu}(\omega)). \end{aligned}$$

Para el cálculo de la corriente es útil tener en cuenta que ya que $\mathbf{G}^r - \mathbf{G}^a = \mathbf{G}^{>} - \mathbf{G}^{<}$,

$$\mathbf{G}^r - \mathbf{G}^a = -i \sum_{\nu} \mathbf{G}^r \Gamma^{\nu} \mathbf{G}^a.$$

Por lo tanto, la corriente de la Ec. (3.32) resulta

$$I = \frac{e}{2h} \int d\omega (f_L(\omega) - f_R(\omega)) \sum_{n,m} \left\{ \Gamma_{n,m}^L(\omega) (\mathbf{G}^r \Gamma^R \mathbf{G}^a)_{n,m} + \Gamma_{n,m}^R(\omega) (\mathbf{G}^r \Gamma^L \mathbf{G}^a)_{n,m} \right\},$$

donde para acoplamientos reales, $\Gamma_{n,m}^R = \Gamma_{m,n}^R$ y $\mathbf{G}_{n,m}^{a,r} = \mathbf{G}_{m,n}^{a,r}$, por lo tanto

$$\boxed{I = \frac{e}{h} \int d\omega (f_L(\omega) - f_R(\omega)) \text{Tr}(\mathbf{G}^a \Gamma^R \mathbf{G}^r \Gamma^L)}, \quad (3.37)$$

que es la misma que la Ec. (3.20).

Definiendo el **coeficiente de transmisión** en términos de las funciones de Green como

$$t_{\sigma,\sigma'} \doteq 2\pi \sum_{n,m} \rho_{L\sigma}^{1/2} \rho_{R\sigma'}^{1/2} V_{L\sigma,n}^* G_{n,m}^r V_{R\sigma',m},$$

la ecuación de la corriente se reduce a la expresión Landauer (Ec. (3.18))

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \text{Tr} [\mathbf{t} \mathbf{t}^{\dagger}(\omega)].$$

Un sistema de tres puntos cuánticos como filtro de espín

4.1 Introducción

4.2 El sistema TQD

4.3 Parámetros experimentales

4.4 Los estados posibles

4.5 El espectro de energía

4.6 El Hamiltoniano efectivo de baja energía

4.7 Propiedades de transporte

4.8 Discusión

Los primeros resultados que presento corresponden a las propiedades de transporte de un sistema de tres puntos cuánticos en presencia de un campo magnético. Sobre la base de una propuesta de [Delgado et al. \[2008\]](#), hemos explorado una configuración que conduce a una corriente polarizada en espín [\[Tosi and Aligia, 2011\]](#). El campo magnético rompe la degeneración de espín y con un ajuste apropiado de las energías locales de los puntos es posible obtener polarización de espín. Usando el campo magnético como una perilla, la conductancia se puede cambiar de alta a baja haciendo que el dispositivo funcione como una válvula de espín. Esta es una interesante aplicación para espintrónica (electrónica basada en el espín).

Por otra parte, a los fines de describir las propiedades de transporte, se muestra que en cierto régimen de parámetros es posible realizar un mapeo a un Hamiltoniano efectivo que describe las características relevantes a baja energía. En este sentido, creo que este problema sirve como una buena introducción para entender nuestro modelo presentado en el **Capítulo 5** para tratar la interferencia en sistemas fuertemente correlacionados.

4.1. Introducción

Un punto cuántico (QD) es una estructura en la que los electrones están confinados de forma tal que su espectro de energía se vuelve discreto. Esta propiedad principal hace que sea una especie de átomo artificial [Reed, 1993] [Kastner, 1993] [Kouwenhoven and Marcus, 1998]. Las propiedades de transporte de estos átomos artificiales formados en islas metálicas [Grabert and Devoret, 1992] y semiconductores [Kouwenhoven et al., 1997] han sido ampliamente estudiadas experimental y teóricamente. La mejora de las capacidades de fabricación ha hecho posible el estudio experimental de sistemas formados por más de un QD. Por ejemplo, sistemas formados por dos puntos cuánticos se han utilizado para estudiar moléculas artificiales donde se puede acceder a diferentes regímenes controlando el acoplamiento mutuo entre los puntos [Waugh et al., 1995] [van der Wiel et al., 2003] [Craig et al., 2004] [Holleitner et al., 2002] [Jeong et al., 2001] [Chen et al., 2004]. También, arreglos de tres puntos cuánticos se han fabricado para estudiar el diagrama de estabilidad [Gaudreau et al., 2006] y, recientemente, los efectos de la frustración de carga [Seo et al., 2013].

Uno de los aspectos de los puntos cuánticos que se ha explorado en los últimos años tiene que ver con el espín [Engel et al., 2004]. Además de la realización de la física de Kondo en puntos cuánticos acoplados a fuente y sumidero [Goldhaber-Gordon et al., 1998b] [Cronenwett et al., 1998] [van der Wiel et al., 2000], ha habido varios experimentos en busca de la manipulación de los estados de espín en puntos cuánticos con la perspectiva prometedora de usarlos para información cuántica [Petta et al., 2005] [Hanson et al., 2007]. La coherencia de los estados de espín en puntos cuánticos con una sola carga [Greilich et al., 2006a] [Greilich et al., 2006b] y la preparación de estados cuánticos de espín [Atatüre et al., 2006] [Berezovsky et al., 2008] han sido investigadas haciendo uso de óptica y, más recientemente, la manipulación de espín se ha demostrado en un sistema de tres puntos cuánticos [Gaudreau et al., 2012].

4.2. El sistema TQD

El sistema que se ha estudiado está formado por tres puntos cuánticos dispuestos en un arreglo triangular como se muestra en la Fig. 4.1. Este sistema puede ser realizado experimentalmente utilizando tensiones electrostáticas en un gas de electrones bidimensional. Es posible obtener puntos cuánticos de diferentes tamaños y controlar sus energías locales separadamente con gran precisión [Gaudreau et al., 2012].

Cada sitio del sistema tiene una energía E_i y los electrones pueden tunear de un sitio a otro con una tasa t_{ij}/\hbar . Además, debido al tamaño finito de los puntos, la ocupación múltiple está castigada con un costo de energía Coulombiana U_i para un dado sitio y V_{ij} entre los sitios vecinos.

En presencia de un campo magnético B , hay dos efectos principales. Por un lado, hay una corrección Zeeman a la energía que rompe la degeneración

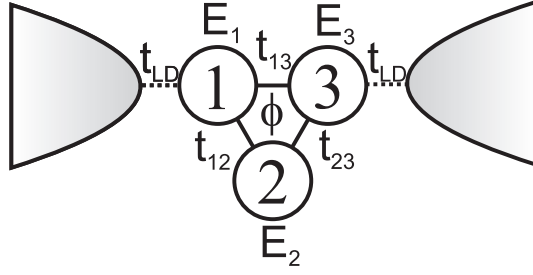


Figura 4.1: Esquema del sistema de tres puntos cuánticos con los parámetros relevantes: las energías de cada punto E_i , la amplitud de *tunneling* entre ellos t_{ij} y el acoplamiento con los reservorios t_{LD} .

espín $\pm \frac{1}{2}g^*\mu_B B$. Por otro lado, el área A del arreglo triangular encierra un flujo BA que afecta el movimiento orbital de los electrones. Esto puede ser tomado en cuenta por una modificación de las amplitudes de *tunneling* t_{ij} para incluir la fase acumulada por el potencial vector.

El Hamiltoniano del sistema es

$$H_{TQD} = \sum_{i,\sigma} E_{i,\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq j}} \tilde{t}_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_i U_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V_{ij} \rho_i \rho_j, \quad (4.1)$$

donde $d_{i\sigma}^\dagger$ ($d_{i\sigma}$) es el operador de creación (destrucción) en el sitio $i = 1, 2, 3$, $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$ es el operador número, y $\rho_i = n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow}$. Las energías de sitio en la presencia del campo magnético externo B son $E_{i,\sigma} = E_0 + E_i - \frac{1}{2}g^*\mu_B B\sigma$, donde E_0 es controlada por la tensión de compuerta, g^* es el factor giro-magnético y $\sigma = \pm 1$. La amplitud de salto entre sitios modificada es $\tilde{t}_{ij} = t_{ij}e^{i2\pi\phi_{ij}}$, donde ϕ_{ij} ($-\phi_{ji}$) es de $\phi_{12} = \phi_{23} = \phi_{31} = -\frac{\phi}{3}$, con $\phi = \frac{AB}{\phi_0}$, la fase en unidades del cuanto de flujo $\phi_0 = \frac{hc}{e}$.

Los electrones llegan y salen del sistema a través de dos cables conectados a los sitios de 1 y 3, los cables izquierdo y derecho. Se describen como dos cadenas semi-infinitas en un modelo de enlace fuerte

$$H_L = \sum_{|i|=1,\sigma} \epsilon c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t_L \sum_{i,\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + H.c. \right). \quad (4.2)$$

El acoplamiento entre los cables y el sistema de tres puntos cuánticos está dada por

$$H_{MIX} = -t_{LD} \left(c_{-1\sigma}^\dagger d_{1\sigma} + c_{1\sigma}^\dagger d_{3\sigma} + H.c. \right), \quad (4.3)$$

donde la amplitud de *tunneling* desde el cable izquierdo y derecho es t_{LD} .

4.3. Parámetros experimentales

Todos los parámetros relevantes para este problema se puede poner en unidades de la amplitud de salto entre puntos cuánticos t_{id} . Un valor típico

es $t_{id} \sim 0.23$ meV. De acuerdo con esto, las energías Coulombianas se fijaron en $U = 50t_{id}$ y $V = 10t_{id}$. El salto en la cadena se tomó como $t_L = 100t_{id}$. La energía de los puntos puede ser sintonizada con los voltajes electrostáticos (en general de una manera interdependiente complicada). Las energías de los puntos se tomaron como $E_1 = 0$ y $E_2 = V - U$. El valor del factor giro-magnético utilizado fue $g^* = 0.44$ y la distancia entre los puntos considerados fue de $d = 61.2$ nm. Con este valor, el campo magnético es $B = \frac{\phi}{A} \approx 1.3 \frac{\phi}{\phi_0}$ [T] (en Tesla) y por lo tanto $g^* \mu_B B \approx 0.14 \frac{\phi}{\phi_0} t_{id}$.

4.4. Los posibles estados

Consideramos un conjunto de parámetros con los que cada punto cuántico tiene sólo un nivel de energía localizado disponible. Hay cuatro estados posibles (vacío, espín arriba o abajo, doblemente ocupado) para cada nivel. En principio, para los tres puntos hay $4^3 = 64$ estados. En lugar de tratar este gran problema, el caso a analizar es el que tiene un número total de uno o dos electrones en el sistema. Para un electrón en total, hay 6 estados posibles mientras que para dos electrones hay $\frac{6!}{2!4!} = 15$ estados.

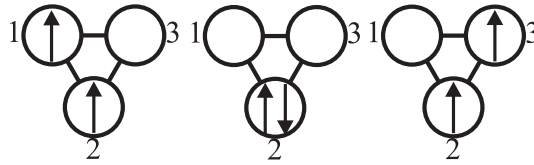


Figura 4.2: Estados relevantes para dos electrones en el sistema de tres puntos cuánticos con asimetría.

Por otra parte, con el fin de ilustrar el comportamiento del filtro de espín en este sistema es suficiente considerar un sistema de tres puntos cuánticos asimétrico en el que la energía del sitio 2 es mucho menor por lo que siempre se ve favorecida con respecto a los otros sitios. Los estados pertinentes de dos electrones (véase la Fig. 4.2) son las que presentan ocupación de los sitios 2 y 1 o sitios 2 y 3, así como el estado con los dos electrones ocupando el sitio 2 (los sitios restantes vacíos). Los estados de un electrón son las proyecciones de espín para arriba y para abajo de un electrón en el sitio 2. Estos estados pueden representarse como (n_1, n_2, n_3) , donde n_i es el número de electrones en sitio i . Los 11 estados relevantes son

$$\mathbf{A} = (1, 1, 0), \quad \mathbf{B} = (0, 1, 1), \quad \mathbf{C} = (0, 2, 0), \quad \mathbf{D} = (0, 1, 0),$$

ya que para \mathbf{A} y \mathbf{B} hay cuatro configuraciones de espín posibles (una que se corresponde con una configuración singlete y tres del triplete).

Los estados posibles se pueden clasificar de acuerdo al espín total S ¹.

¹Los operadores de espín se definen como $S_z = \sum_i \frac{1}{2} (d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\uparrow} - d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\downarrow})$, $S^+ = \sum_i d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\downarrow}$ y $S^- = \sum_i d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\uparrow}$. El espín total S está dado por el valor propio $S(S+1)$ del operador $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{S^+ S^-}{2} + \frac{S^- S^+}{2} + S_z^2$

Los estados de un electrón tienen $S = 1/2$. Los estados de dos electrones pueden ser estados singlete con $S = 0$

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\downarrow}^\dagger - d_{1\downarrow}^\dagger d_{2\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle, \\ |\beta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(d_{2\uparrow}^\dagger d_{3\downarrow}^\dagger - d_{2\downarrow}^\dagger d_{3\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle, \\ |\gamma\rangle &= d_{2\uparrow}^\dagger d_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \end{aligned}$$

o estados triplete con $S = 1$

$$\begin{aligned} |S = 1, S_z = 1, a\rangle &= d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, \\ |S = 1, S_z = 0, a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(d_{1\uparrow}^\dagger d_{2\downarrow}^\dagger + d_{1\downarrow}^\dagger d_{2\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle, \\ |S = 1, S_z = -1, a\rangle &= d_{1\downarrow}^\dagger d_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, \\ |S = 1, S_z = 1, b\rangle &= d_{2\uparrow}^\dagger d_{3\uparrow}^\dagger |0\rangle, \\ |S = 1, S_z = 0, b\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(d_{2\uparrow}^\dagger d_{3\downarrow}^\dagger + d_{2\downarrow}^\dagger d_{3\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle, \\ |S = 1, S_z = -1, b\rangle &= d_{2\downarrow}^\dagger d_{3\downarrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned}$$

4.5. El espectro de energía

La clasificación de los posibles estados compatibles con un dado espín total es muy útil ya que S^2 es una cantidad conservada, es decir S es un buen número cuántico. El Hamiltoniano de la Ec. (4.1) se divide en bloques. En el espacio singlete,

$$\begin{aligned} H_{TQD}|\alpha\rangle &= E_A|\alpha\rangle + \sqrt{2}\tilde{t}_{21}|\gamma\rangle + \tilde{t}_{31}|\beta\rangle, \\ H_{TQD}|\beta\rangle &= E_C|\beta\rangle + \sqrt{2}\tilde{t}_{23}|\gamma\rangle + \tilde{t}_{13}|\alpha\rangle, \\ H_{TQD}|\gamma\rangle &= E_B|\gamma\rangle + \sqrt{2}\tilde{t}_{32}|\beta\rangle + \sqrt{2}\tilde{t}_{12}|\alpha\rangle, \end{aligned}$$

donde $E_A = (E_1 + E_2 + 2E_0 + V_{12})$, $E_C = (E_3 + E_2 + 2E_0 + V_{23})$ y $E_B = (2E_2 + 2E_0 + U)$. Si los sitios 1 y 3 son equivalentes, $E_A = E_C$. Introduciendo $\phi = \frac{2\pi\phi}{3}$ explícitamente en \tilde{t}_{ij} y considerando $t_{ij} = t_{ji} = t_{id}$, el Hamiltoniano se puede escribir como una matriz simple

$$H_{red}^{S=0} = \begin{pmatrix} E_A & t_{id}e^{-i\varphi} & \sqrt{2}t_{id}e^{i\varphi} \\ t_{id}e^{i\varphi} & E_A & \sqrt{2}t_{id}e^{-i\varphi} \\ \sqrt{2}t_{id}e^{-i\varphi} & \sqrt{2}t_{id}e^{i\varphi} & E_B \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

que puede diagonalizarse para dar la energía más baja que se muestra como función del flujo magnético en la Fig. 4.3 con una línea negra continua. En el espacio $S = 0$, la energía es periódica en unidades del cuanto de flujo. En la figura se muestra también la energía para el estado de un electrón con espín para arriba con una línea roja discontinua.

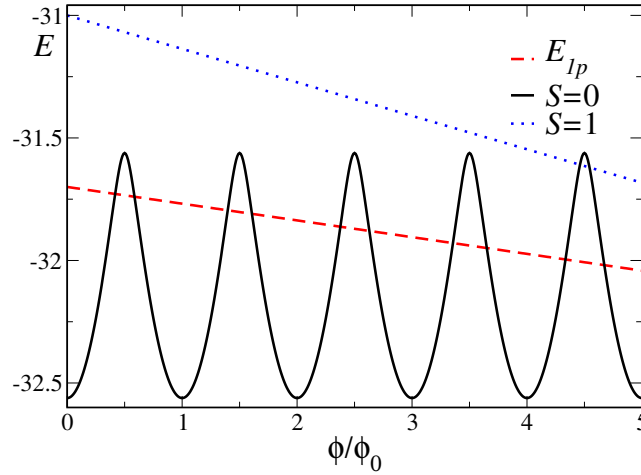


Figura 4.3: Espectro de energía en función del flujo magnético ϕ/ϕ_0 . La línea negra continua corresponde al estado de más baja energía en el espacio singlete, mientras que la línea a trazos roja es la energía del estado con un electrón y la línea punteada azul es el estado de energía más bajo del espacio triplete. Los puntos de interés son los puntos de cruce donde estados con uno y dos electrones están degenerados. La configuración triplete no es relevante hasta campos magnéticos muy altos.

El espacio triplete es más sencillo de resolver teniendo en cuenta que S_z es también un buen número cuántico. Para cada una de las proyecciones hay una matriz de 2×2

$$H_{red}^{S=1, S_z} = \begin{pmatrix} E_A - g^* \mu_B B S_z & t_{id} e^{-i\varphi} \\ t_{id} e^{i\varphi} & E_A - g^* \mu_B B S_z \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

que puede diagonalizarse para dar los auto-energías

$$E_{trip} = (E_a - g^* \mu_B B S_z) \pm t_{id}, \quad (4.6)$$

donde la energía es menor con el signo menos y para $S_z = 1$. Esto también se muestra en la Fig. 4.3 con una línea azul discontinua. La energía del estado triplete es mucho mayor que la del estado de un electrón y la del singlete. Estos estados se vuelven relevantes para campos magnéticos mayores, $BA \sim 10\phi_0$.

Como se muestra en la figura, hay cruces en energía entre los estados fundamentales de un electrón y los dos electrones. En los puntos donde estos estados están degenerados, no hay costo de energía para que los electrones entren o salgan del sistema de puntos cuánticos. Como se discute más adelante, hay un máximo de la transmisión en estos puntos.

4.6. El Hamiltoniano efectivo de baja energía

La región de parámetros más interesante para las propiedades de transporte está cerca de los puntos de degeneración. Estos pueden ser sintonizados experimentalmente con voltajes de compuerta. Si el análisis se restringe

a los niveles de baja energía, es posible hacer caso omiso de los otros niveles y considerar un **Hamiltoniano efectivo**. Este modelo efectivo consiste en un único punto cuántico (QD) ficticio, que puede estar vacío o con un electrón de espín para arriba (ver Fig. 4.4).

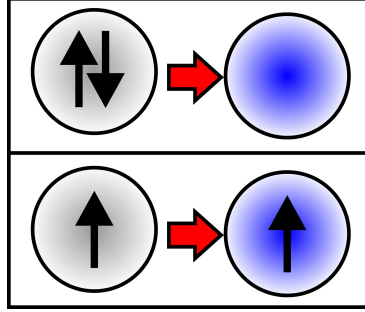


Figura 4.4: Ilustración del mapeo cerca de los puntos de degeneración. El sistema de tres puntos cuánticos se mapea en un solo punto cuántico ficticio con un único nivel de energía. Los dos estados relevantes: el estado con dos electrones en una configuración singlete y el estado con un electrón de espín para arriba se mapean a un estado vacío y un estado ocupado de espín para arriba, respectivamente.

El estado fundamental para dos electrones $|2g\rangle$ se mapea al estado vacío $|0\rangle$ del QD efectivo ficticio. Del mismo modo, el estado fundamental de un electrón $|1g\rangle$ se mapea a $\tilde{d}^\dagger|0\rangle$. Por simplicidad, en la siguiente derivación se supone que $|1g\rangle$ tiene espín para arriba (este es el caso para $B > 0$). De lo contrario espín para arriba y para abajo debe ser intercambiado en lo que sigue. Introduciendo los operadores de hueco $h_j = e^{i\varphi_j} c_{j\downarrow}^\dagger$ para los cables (con fases φ_j elegidas de tal manera que \tilde{t}_{LD} resulte real y positivo), el Hamiltoniano efectivo toma la forma

$$H_{eff} = t_L \left[\sum_{i=-1}^{-\infty} \left(h_i^\dagger h_{i-1} + \text{H.c.} \right) + \sum_{i=1}^{+\infty} \left(h_i^\dagger h_{i+1} + \text{H.c.} \right) \right] + E_d \tilde{d}^\dagger \tilde{d} - \tilde{t}_{LD} (h_{-1}^\dagger \tilde{d} + h_1^\dagger \tilde{d} + \text{H.c.}), \quad (4.7)$$

en donde

$$E_d = E_{1g} - E_{2g}, \quad \tilde{t}_{LD} = t_{LD} |\langle 2g | d_{1\downarrow}^\dagger | 1g \rangle|, \quad (4.8)$$

y E_{ng} es la energía de $|ng\rangle$. Como se ilustra en la Fig. 4.5, los electrones que pueden saltar al sistema de tres puntos, pasando de $|1g\rangle$ a $|2g\rangle$, tienen el **espín opuesto** a $|1g\rangle$. Así **la conducción de espín hacia arriba es cero y la corriente se polariza con espín hacia abajo**.

4.7. Propiedades de transporte

Como se muestra en la Fig. 4.6, el problema se ha reducido al modelo analizado en el **Capítulo 3**, con los cables descritos por cadenas semi-infinitas.

En el límite de respuesta lineal, válido cuando los acoplamientos a izquierda y derecha son proporcionales, la conductancia está dada por

$$G_e = \frac{2\pi e^2}{h} \sum_{\sigma} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \Gamma_{\sigma}(\omega) \rho_d^{\sigma}(\omega) d\omega,$$

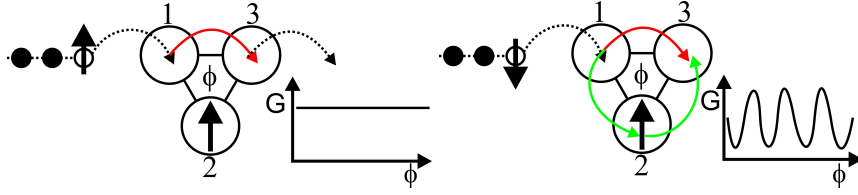


Figura 4.5: Polarización de la corriente: como se discute en el texto, el electrón que entra en el sistema de tres puntos cuánticos debe tener espín opuesto con respecto al electrón que ocupa el sitio 2 con el fin de permanecer en el estado de baja energía.

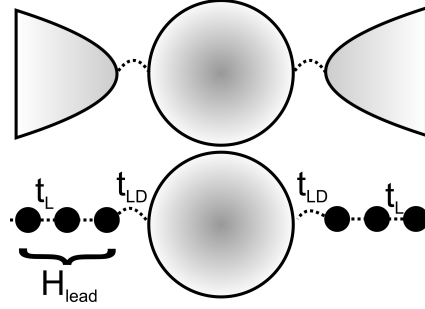


Figura 4.6: Los cables que están conectados al punto cuántico ficticio efectivo pueden ser descriptos con un modelo de enlace fuerte como cadenas semi-infinitas.

donde $\rho_d^\sigma(\omega)$ es la densidad local de estados del nivel localizado en el modelo efectivo, $f(\omega)$ es la función de Fermi y

$$\Gamma_\sigma(\omega) = \frac{\Gamma_{-1\sigma}(\omega)\Gamma_{1\sigma}(\omega)}{\Gamma_{-1\sigma}(\omega) + \Gamma_{1\sigma}(\omega)},$$

es el acoplamiento efectivo con $\Gamma_{i\sigma}(\omega) = 2\pi(\tilde{t}_i)^2\rho_{i\sigma}(\omega)$ y $\tilde{t}_1 = \tilde{t}_{-1} = \tilde{t}_{LD}$. En esta expresión, $\rho_{i\sigma}(\omega)$ es la densidad local de estados del primer sitio de la cadena semi-infinita

$$\rho_1^\sigma = \rho_{-1}^\sigma = \frac{1}{\pi t_L} \left[1 - \left(\frac{\omega}{2t_L} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

En esta imagen efectiva, hay un nivel localizado hibridado con los electrones de conducción de los cables. El efecto de esta hibridación es que el nivel localizado adquiere un tiempo de vida finito. El ancho del nivel de energía en resonancia es $\Delta_\sigma(\omega) = \pi \sum_i (\tilde{t}_i)^2 \rho_i^\sigma(\omega) = \pi \rho_1^\sigma [(\tilde{t}_1)^2 + (\tilde{t}_{-1})^2]$. Por tanto,

$$\Gamma_\sigma(\omega) = \frac{2(\tilde{t}_1)^2(\tilde{t}_{-1})^2}{[(\tilde{t}_1)^2 + (\tilde{t}_{-1})^2]^2} \Delta_\sigma(\omega) = \frac{\Delta_\sigma(\omega)}{2},$$

dado que $\tilde{t}_1 = \tilde{t}_{-1}$.

En el régimen de respuesta lineal, esto puede ser evaluada en el nivel de Fermi $\epsilon_F = 0$, así

$$G_e = \frac{e^2}{h} \pi \Delta(0) \sum_\sigma \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right) \rho_d^\sigma(\omega) d\omega, \quad (4.9)$$

y la tarea restante es calcular la densidad de estados del nivel localizado. Esto se puede hacer usando la ecuación de movimiento para la función de Green [Tosi and Aligia, 2011] o mediante la construcción de una ecuación de Dyson diagramática. El resultado es

$$\rho_d^\sigma = \frac{4\tilde{t}_{LD}^2 [4t_L^2 - \omega^2]^{\frac{1}{2}}}{\pi \left\{ [(\omega - E_d)\omega - 4\tilde{t}_{LD}^2]^2 + (\omega - E_d)^2 [4t_L^2 - \omega^2] \right\}}, \quad (4.10)$$

y está graficada en la Fig. 4.7 para diferentes valores de la amplitud de salto t_L y para $E_d = 0$, lo que corresponde a los puntos de degeneración.

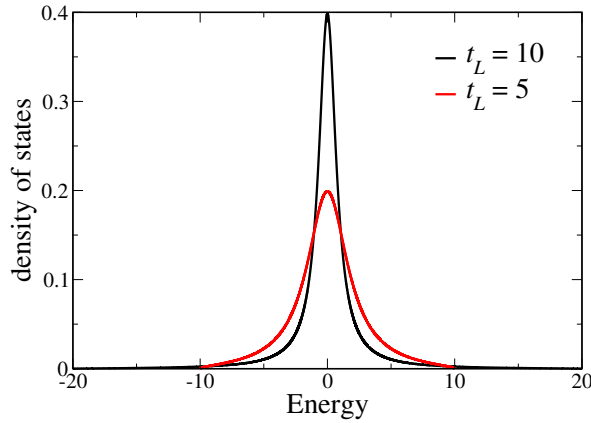


Figura 4.7: Densidad de estados ρ_d^σ en función de la energía para dos valores de la amplitud de tunneling t_L .

El ancho del nivel resonante puede ser bien aproximada por $\Delta(0) \sim 2 \frac{(t_{LD})^2}{t_L}$ ($\Delta(0) \sim 0.1 t_{id}$) para $\omega \sim 0$. Es por ello que, para mayor t_L o menor acoplamiento t_{LD} , la resonancia se hace más estrecha.

De la Ec. (4.9), es evidente que a bajas temperaturas la conductancia en el régimen respuesta lineal imita a la densidad de estados. En la Fig. 4.8, la conductancia como función del flujo magnético se muestra para diferentes temperaturas y dos valores del acoplamiento t_{LD} .

Para este modelo efectivo, sólo hay un espín que contribuye a la corriente. A temperatura cero, la densidad de estados puede ser evaluado en el nivel de Fermi,

$$\rho_d^\sigma(0) = \frac{1}{\pi \Delta(0)}, \quad (4.11)$$

Por lo tanto, $G(T = 0) = \frac{e^2}{h} = G_0$, es decir, la mitad del cuanto de conductancia.

Cada vez que hay un cruce de niveles a medida que el flujo es variado, $E_d = 0$ y puesto que el nivel de Fermi se fija también en cero, hay un máximo de la conductancia. Los picos de conductancia son más anchos para acoplamientos más grandes y el valor es cercano al máximo posible cerca de $T = 0$. Puesto que la corriente de espín para arriba está prohibida, el resultado es una corriente de espín polarizada hacia abajo que se puede activar

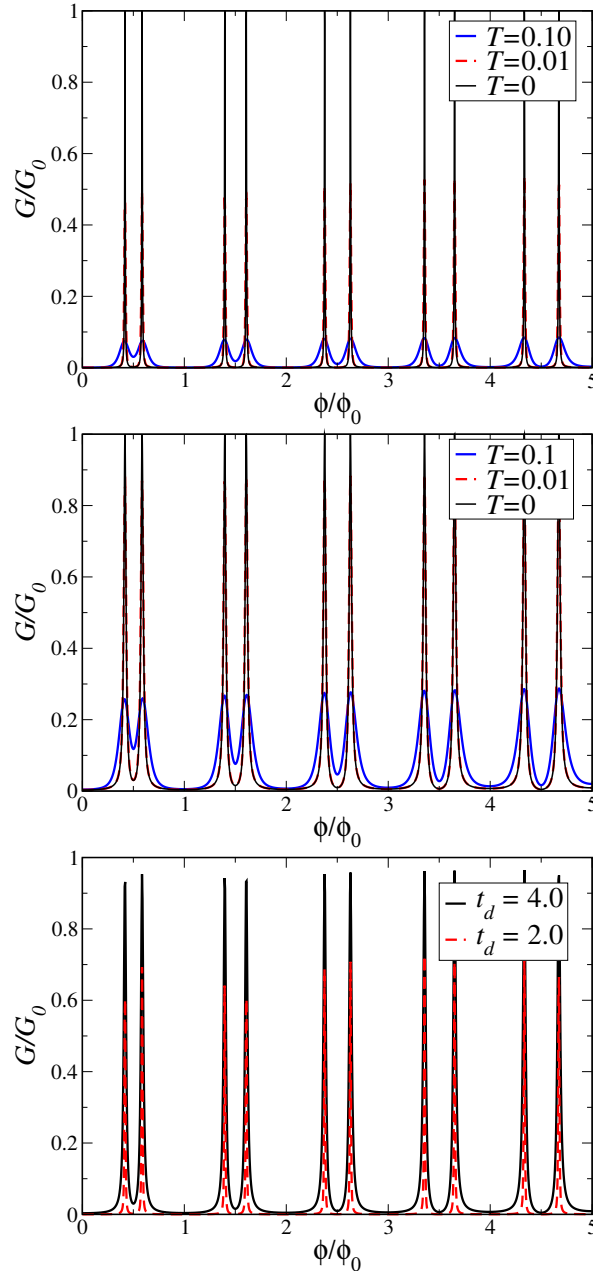


Figura 4.8: Conductancia en función del flujo magnético ϕ/ϕ_0 (a) para $t_{LD} = 2$ y (b) $t_{LD} = 4$, para diferentes temperaturas; y (c) a temperaturas muy bajas para $t_{LD} = 4$ (curva negra) y $t_{LD} = 2$ (curva discontinua roja).

o desactivar con flujo magnético. Esto es un **filtro de espín sintonizable**. Si el campo magnético se invierte, la corriente puede estar polarizada con el espín opuesto.

En la Ref. [Tosi and Aligia, 2011] hemos explorado también la posibilidad de tener un filtro de espín en la presencia de interacción espín-órbita. Esto puede ser relevante con los avances en la fabricación sobre gases de electrones bidimensionales en InAs.

4.8. Discusión

El modelo efectivo utilizado aquí para calcular las propiedades de transporte es válido una vez que el desdoblamiento Zeeman del nivel de un electrón es mayor que el ancho $\Delta(0)$. Si este no es el caso, ambos estados están cuasi-degenerados y este enfoque no es válido. De hecho, en este sistema interactuante (presenta una repulsión Coulombiana entre los electrones) hay correlaciones fuertes cuando se mantiene la degeneración de espín. Esto puede dar lugar a efectos muy interesantes, como el efecto Kondo.

En el siguiente capítulo, se presenta un modelo para el tratamiento de un sistema interactuante, donde hay dos estados relevantes para el transporte que están degenerados en espín y muy cerca en energía. Esto es, en el mismo sentido que aquí, un modelo efectivo. Puede ser muy útil para describir las propiedades de transporte de sistemas complejos que exhiben efectos de interferencia. Además, con nuestro modelo se abre la posibilidad de estudiar la interrelación entre la interferencia cuántica y el efecto Kondo en sistemas mesoscópicos.

Un modelo para la interferencia en sistemas fuertemente correlacionados

“In two slit interference, quantum mechanics cannot determine which slit the electron went through”. This statement reflects not the poverty of quantum mechanics, but its richness. In classical mechanics, an electron must have a position -it must pass through one slit or the other. In quantum mechanics an electron might have a position, but there is an infinitely rich variety of other possibilities as well.”

Dan Styer.

- 5.1 Introducción
- 5.2 Un modelo efectivo para la interferencia
- 5.3 Propiedades de transporte
- 5.4 Encontrando las funciones de Green
- 5.5 Conservación de la corriente

Desde la perspectiva que se presenta en esta tesis la descripción de las propiedades de transporte en sistemas mesoscópicos comienza con la identificación de los diferentes ingredientes. Hay **reservorios de electrones** que proporcionan portadores apropiadamente termalizados con un potencial electroquímico bien definido. Estos viajan por **cables** que pueden ser vistos como guías de ondas de electrones con modos transversales disponibles. Estos reservorios y cables pueden ser descritos como las bandas en un metal o en una versión discretizada utilizando un modelo de enlace fuerte (como las cadenas semi-infinitas en el **Capítulo 4**). Los cables conectan los reservorios con un **conductor central** cuyas propiedades determinan las principales características en el transporte.

Es muy importante tener en cuenta que en un sistema general, **la geometría de la conexión** entre el conductor central y los cables juega un papel muy importante. En el sistema de tres puntos cuánticos descrito en el **Capítulo 4** por ejemplo, la configuración particular propuesta permitió obtener

una corriente polarizada en espín. Para hacer este punto más claro el conductor central puede ser una estructura artificial formada por un conjunto de puntos cuánticos o una molécula real. Los cables de fuente y sumidero se conectan a algunos de los sitios (o átomos) de estas estructuras definiendo una cierta geometría. La tasa a la cual los electrones tunelean entrando y saliendo del conductor depende esencialmente de la superposición entre la función de onda del estado localizado en el conductor central y de los estados de conducción en los cables.

5.1. Introducción

Para el conductor central, las funciones de onda son, en general, funciones de onda de muchos cuerpos que pueden ser muy difíciles de calcular exactamente y que dependen de los detalles particulares (energías locales, interacción electrón-electrón, incluso de la presencia de cables). Sin embargo, estamos interesados en los casos en que hay alguna **simetría** de la estructura (un arreglo triangular o una molécula en forma de anillo, como los anulenos) que es heredada por estos estados de muchos cuerpos. El punto interesante es preguntarse **cuál es el efecto de la simetría de las funciones de onda en el transporte dada la geometría definida por la conexión**.

En una imagen simple, la **interferencia cuántica** en el transporte puede ser entendida como una consecuencia de las diferentes rutas posibles que pueden tomar los electrones para ir desde la fuente al sumidero, es decir, para viajar conectando estos dos puntos. De acuerdo con la simetría del sistema, cada uno de los caminos puede acumular una fase diferente y el módulo al cuadrado de la suma de las amplitudes da lugar a interferencia. Esto significa un aumento o disminución de la corriente.

En un conductor complejo los fenómenos de interferencia cuántica se pueden entender de una manera similar teniendo en cuenta la simetría de las funciones de onda y de la geometría de conexión. La idea es que los **posibles caminos** ahora son los estados de muchos cuerpos que pueden ser ocupados por electrones de conducción que tunelean en el conductor a una cierta energía. Estos “caminos cuánticos de muchos cuerpos” pueden estar degenerados o muy cercanos en energía y tienen una simetría compatible con la de la estructura. Para fijar la idea, puede ser una estructura en forma de anillo, donde los estados de muchos cuerpos están etiquetados por el vector de onda de Bloch $|\pm K\rangle$ que es compatible con la simetría de traslación en el anillo. El análogo de las **amplitudes** para cada uno de estos estados son las amplitudes de *tunneling* de los cables a fuente y sumidero. Puesto que éstas dependen de la superposición de las funciones de onda de muchos cuerpos, pueden producirse fenómenos de interferencia cuando hay diferencias de fase entre estos acoplamientos.

En el problema estudiado en el **Capítulo 4** enfatice que hay puntos en el espectro de energía del conductor, donde los estados fundamentales con N y $N \pm 1$ electrones se vuelven degenerados. Cerca de estos puntos, el costo

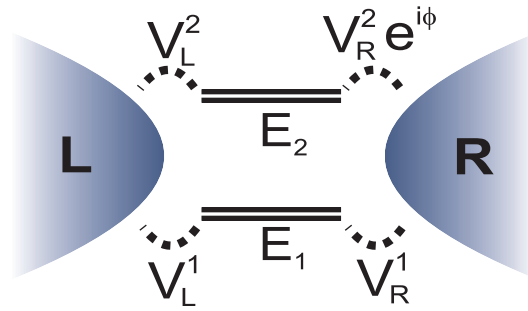


Figura 5.1: Esquema de los parámetros relevantes de nuestro modelo para el tratamiento de problemas de interferencia en sistemas mesoscópicos interactuantes. Hay dos dobles con energías E_1 y E_2 que se acoplan a izquierda y derecha de tal manera que uno de los coeficientes de acoplamiento es complejo. La fase ϕ está relacionada con la simetría de los estados localizados y con la geometría de la conexión. Puede ser pensada como la “diferencia de fase” entre los dos caminos.

de energía de los electrones de conducción para entrar y salir del sistema es mínimo y el transporte es favorable. Por lo tanto, los regímenes más interesantes en cuanto a las propiedades de transporte son cerca de estos puntos. Dentro de cierta región de parámetros es posible hacer caso omiso de otros niveles de energía y conservar las características esenciales del transporte con un **Hamiltoniano efectivo**. Este Hamiltoniano efectivo es apropiado para tratar la física de baja energía.

Con el fin de describir los fenómenos de interferencia consideramos un caso en que un estado con N electrones se vuelve casi degenerado con dos estados con $N \pm 1$ electrones. Consideramos N par y proponemos un modelo efectivo para la física de baja energía con dos dobles que pueden tener diferentes acoplamientos a fuente y sumidero. En el caso más general, estos acoplamientos son números complejos. Al hacer ciertas transformaciones de calibre, tres de ellos se pueden hacer reales. Hay una fase compleja que da cuenta de la posible **diferencia de fase** entre los “caminos de muchos cuerpos”. El modelo es adecuado para describir los efectos de interferencia en sistemas muy generales. Además, dado que los estados localizados degenerados son dobles y considerando sólo un electrón (o hueco) extra en el sistema (que es como tener una repulsión de Coulomb infinita), el modelo puede también describir los efectos de las correlaciones fuertes y es posible estudiar la interrelación entre la interferencia cuántica y el efecto Kondo.

5.2. Un modelo efectivo para la interferencia

Nuestro modelo efectivo, al que llamamos el *modelo de Aligia* es un modelo de Anderson generalizado. Conserva los ingredientes esenciales para dar cuenta de la interferencia y también para describir el efecto de la fuerte interacción de Coulomb en sistemas nanoscópicos.

Como se explica en la introducción, el modelo describe la física de baja

energía cerca de un punto de degeneración donde un estado con N electrones se vuelve degenerado con dos estados que difieren en un electrón ($N \pm 1$). El nivel de N electrones, con N par, se considera un singlete con energía E_s y los estados de $N \pm 1$ electrones son dos dobletes con energía E_i ($i = 1, 2$). Esto se muestra en la Fig. 5.1.

El Hamiltoniano efectivo es

$$H = E_s|0\rangle\langle 0| + \sum_{i\sigma} E_i|i\sigma\rangle\langle i\sigma| + \sum_{\nu k\sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k\sigma}^\dagger c_{\nu k\sigma} + \sum_{i\nu k\sigma} (V_\nu^i|i\sigma\rangle\langle 0|c_{\nu k\sigma} + \text{H.c.}), \quad (5.1)$$

donde el singlete $|0\rangle$ y los dos dobletes $|i\sigma\rangle$ ($i = 1, 2$, $\sigma = \uparrow$ o \downarrow) denotan los estados localizados, $c_{\nu k\sigma}^\dagger$ crea estados de conducción en el cable a la izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$), y V_ν^i describe los elementos de salto entre los cables y los dos dobletes, asumidos independientes de k .

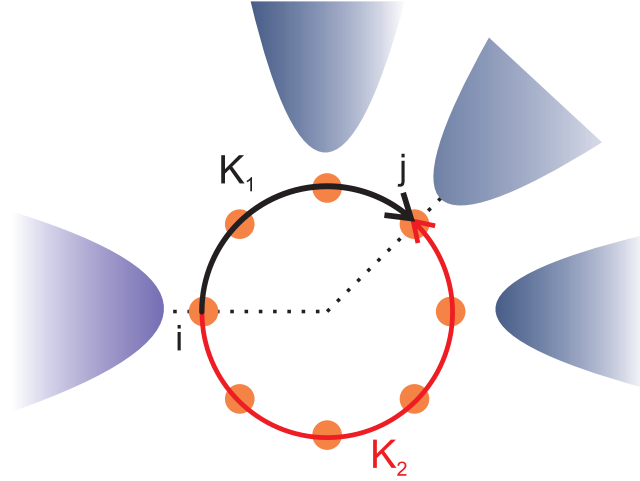


Figura 5.2: Los estados de muchos cuerpos se identifican de acuerdo a su simetría con K_1 y K_2 . Los electrodos a la izquierda y derecha están conectados de tal manera que una diferencia de fase puede aparecer en el transporte.

Se debe recordar que este modelo efectivo tiene que ser conectado con los parámetros pertinentes del sistema “real”. Por una transformación de calibre, tres de los cuatro V_ν^i se pueden hacer reales y positivos. Si el sistema es un anillo con los cables ν conectados en los sitios j_ν , el salto efectivo restante puede ser elegido como $V_R^2 = |V_R^2|e^{-i\phi}$, donde $\phi = (j_R - j_L)(K_2 - K_1)$ y K_i es el vector de onda de $|i\sigma\rangle$. Esto se ilustra en la Fig. 5.2. La magnitud de los elementos de salto está dada por

$$|V_\nu^i| = |t_\nu \langle i\sigma | d_{j_\nu\sigma}^\dagger | 0 \rangle|,$$

donde t_ν es el salto de entre el sitio j_ν y el cable ν y $d_{j_\nu\sigma}^\dagger$ crea un electrón (o un hueco en función del signo de la tensión de compuerta) en el sitio de j .

Este modelo describe el transporte cerca de un punto en el que un electrón puede entrar o salir del sistema con un coste mínimo de energía ocupando dos estados de muchos cuerpos con una simetría que hace que sus

acoplamientos a los cables tengan diferente fase. Eso significa que, en el contexto del modelo efectivo hay sólo un electrón (o hueco). Esta es una observación muy importante, ya que significa que el modelo efectivo es un modelo de Anderson generalizado con repulsión de Coulomb infinita. **Esto prohíbe tener más de un electrón a la vez en el sistema.** Este punto debe tenerse en cuenta porque si más de un electrón está implicado en el transporte en algún régimen ¹, este modelo efectivo no es válido.

5.3. Propiedades de transporte

El Hamiltoniano de la Ec. (5.1) es un caso particular del modelo que se analiza en el **Capítulo 3** para describir las propiedades de transporte (ver Ec. (3.21)). Es más conveniente expresar la parte localizada como

$$H_C = \sum_{i,\sigma} E_i d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \text{Coulomb interaction},$$

donde sin pérdida de generalidad $E_s = 0$. La expresión general para la corriente a través de regiones interactuantes que se puede emplear para voltajes y temperatura finitos está dada en términos de las funciones de Green de no-equilibrio del conductor central calculadas en presencia de los cables

$$I = \frac{ie}{2\hbar} \int d\omega [Tr \{(\Gamma^L f_L(\omega) - \Gamma^R f_R(\omega))(G_d^r(\omega) - G_d^a(\omega))\} + Tr \{(\Gamma^L - \Gamma^R)G_d^<(\omega)\}], \quad (5.2)$$

donde f_L (f_R) es la función de distribución de Fermi para el cable izquierdo (derecho), Γ^ν es la matriz de hibridación definida como

$$\Gamma_{ij,\sigma}^\nu(\omega) = 2\pi \sum_k V_\nu^i V_\nu^{j*} \delta(\omega - \epsilon_{k,\nu,\sigma}),$$

y las funciones de Green se definen como

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^<(t-t') &= +i\langle d_{j\sigma}^\dagger(t') d_{i\sigma}(t) \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^>(t-t') &= -i\langle d_{i\sigma}(t) d_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^r(t-t') &= -i\theta(t-t') \langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^a(t-t') &= +i\theta(t'-t) \langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle. \end{aligned}$$

El cálculo de estas funciones de Green para un sistema interactuante en presencia del acoplamiento con los electrones de conducción es una tarea formidable. Una complicación adicional es el hecho de que este cálculo debe realizarse fuera de equilibrio para voltaje arbitrario. Calculamos estas funciones de Green con una aproximación diagramática llamada aproximación

¹Este sería el caso cuando la hibridación es del orden de la repulsión de Coulomb

non-crossing (NCA) y algunos puntos importantes se discuten en la siguiente sección.

Es digno de notar que dado que los acoplamientos V_ν^i son independientes del espín y del impulso,

$$\Gamma_{ij,\sigma}^\nu(\omega) = 2\pi V_\nu^i V_\nu^{j*} \sum_k \delta(\omega - \epsilon_{k,\nu,\sigma}) = \frac{\pi}{D} V_\nu^i V_\nu^{j*}, \quad (5.3)$$

donde la densidad de estados para los electrones de conducción se toma constante desde $-D$ a D , con D la mitad de la ancho de banda. Incluso si hay simetría entre derecha-izquierda en los acoplamientos, $|V_L^i| = |V_R^i| = |V^i|$, la fase compleja $V_R^2 = V_2 e^{-i\phi}$ hace que las matrices de hibridación

$$\Gamma_\sigma^L = \frac{\pi}{D} \begin{pmatrix} V_1^2 & V_1 V_2 \\ V_1 V_2 & V_2^2 \end{pmatrix}, \quad \Gamma_\sigma^R = \frac{\pi}{D} \begin{pmatrix} V_1^2 & V_1 V_2 e^{-i\phi} \\ V_1 V_2 e^{i\phi} & V_2^2 \end{pmatrix},$$

no sean proporcionales ². No es posible hacer desaparecer la función de Green menor (ver Sec. 3.3) y el cálculo en respuesta lineal no es válido. En este modelo efectivo, las propiedades de transporte tienen que calcularse con la expresión general de la Ec. (5.2). La conductancia diferencial puede obtenerse a través de la diferenciación numérica de la corriente obtenida a diferentes voltajes.

Teniendo en cuenta que $G^r - G^a = G^> - G^<$, la corriente se puede expresar en términos sólo de las funciones de Green menores y mayores

$$I = \frac{ie}{2h} \int d\omega \left[\text{Tr} \left\{ (\Gamma^L f_L(\omega) - \Gamma^R f_R(\omega)) G_{\mathbf{d}}^>(\omega) \right\} + \text{Tr} \left\{ (\Gamma^L (1 - f_L(\omega)) - \Gamma^R (1 - f_R(\omega))) G_{\mathbf{d}}^<(\omega) \right\} \right],$$

que es muy útil para los cálculos.

5.4. Encontrando las funciones de Green

Este es un punto relativamente técnico pero de fundamental importancia. Con el fin de encontrar las funciones de Green menores y mayores, es necesario calcular los valores de expectación

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^<(t-t') &= +i \langle d_{j\sigma}^\dagger(t') d_{i\sigma}(t) \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^>(t-t') &= -i \langle d_{i\sigma}(t) d_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle, \end{aligned}$$

para el Hamiltoniano de la Ec. (5.1) con repulsión de Coulomb infinita y en presencia de los cables. Esto se puede hacer con la **aproximación non-crossing** (NCA). La NCA es una aproximación diagramática que incluye diagramas de todos los órdenes en perturbaciones en la hibridación. El núcleo

² $\Gamma_\sigma^L = \lambda \Gamma_\sigma^R$ si $\phi = 0$

de la NCA es un conjunto de ecuaciones de Dyson que tienen que ser resueltas auto-consistentemente. En comparación con otras técnicas numéricas (tales como el grupo de renormalización numérica (NRG)), esta aproximación diagramática se puede extender para tratar muchos niveles y es adecuada para cálculos fuera de equilibrio. La NCA ha demostrado describir muy bien el efecto Kondo y dar la escala de energía, la temperatura Kondo T_K , correcta. Se puede utilizar a temperaturas bajas de hasta $0.1 T_K$ y la precisión mejora con una mayor degeneración. Se ha demostrado que coincide con el NRG en varias décadas de temperatura y describe correctamente las leyes de escala de las propiedades de transporte fuera de equilibrio.

Creo que la NCA es una herramienta muy útil para calcular las propiedades de transporte. Hemos realizado varias pruebas en diferentes condiciones y se encontró muy buen acuerdo con otras técnicas. En particular, los cálculos que resultaron posibles con la NCA ciertamente no son accesibles a otras técnicas más robustas. La razón es que la mayoría de ellas fueron concebidas para resolver el problema de Kondo de impurezas magnéticas en metales, que es un problema de equilibrio. En el escenario de transporte a través de puntos cuánticos modelados con el modelo de Anderson, el uso de algunas de estas técnicas se basa en asumir la validez de un enfoque de respuesta lineal. En este caso, la conductancia se puede calcular con la densidad de estados de la impureza en equilibrio. Para los problemas que hemos analizado, la NCA es realmente una buena opción, y hemos encontrado que incluso las características a voltaje finito están bien reproducidas por la NCA mientras que pueden ser pasadas por alto con otras técnicas.

He decidido incluir los detalles de la aproximación en los apéndices al final. En la Sec. A.5 del **Apéndice A** se presenta una derivación diagramática de las ecuaciones de la NCA. Los detalles técnicos y las expresiones analíticas se demuestran en el **Apéndice B**. La extensión de la aproximación *non-crossing* fuera de equilibrio se explica en el **Apéndice C**. La extensión de la NCA para el modelo Aligia se presenta aquí.

Representación en partículas auxiliares

El primer paso para construir la NCA es introducir partículas auxiliares que representan las posibles ocupaciones del conductor central. De acuerdo con el modelo efectivo, es suficiente considerar el estado vacío $|0\rangle$ y cuatro estados $|i\sigma\rangle$. Esto corresponde a $U \rightarrow \infty$ del modelo de Anderson (que prohíbe la doble ocupación). Las partículas auxiliares se introducen de acuerdo a la identificación

$$\begin{cases} |0\rangle \rightarrow b^\dagger |vac\rangle \\ |i\sigma\rangle \rightarrow f_{i\sigma}^\dagger |vac\rangle \end{cases}$$

donde $f_{i\sigma}^\dagger$ crea un pseudo-fermión y b^\dagger es el operador del bosón vacío. En esta representación, el operador físico es $d_{i\sigma}^\dagger = f_{i\sigma}^\dagger b$ y

$$H_C = \sum_{i\sigma} E_i f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}.$$

El término de hibridación es

$$H_{MIX} = \sum_{k\nu i\sigma} \left(V_{\nu}^i c_{k\nu\sigma}^{\dagger} b^{\dagger} f_{i\sigma} + H.c. \right),$$

y el operador del número total de partículas es

$$Q = b^{\dagger} b + \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma},$$

que se fija a uno $Q = 1$ con el fin de restringir las posibles ocupaciones al espacio de Hilbert físico. Esta restricción es muy importante y puede ser tomada en cuenta con un multiplicador de Lagrange, $K = H + \lambda Q$. La NCA es una técnica diagramática que puede ser construida a partir de una expansión perturbativa en el acoplamiento V . Para ello, el Hamiltoniano se separa como $K = K_0 + K_1$, con

$$\begin{aligned} K_0 &= H_L + H_R + \sum_{i\sigma} (E_i + \lambda) f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + \lambda b^{\dagger} b, \\ K_1 &= \sum_{k\nu i\sigma} \left(V_{\nu}^i c_{k\nu\sigma}^{\dagger} b^{\dagger} f_{i\sigma} + H.c. \right). \end{aligned}$$

La función de Green física

La función de Green física se puede expresar en la representación de partículas auxiliares. Una vez hecho esto, el problema es el cálculo de las funciones de Green de las partículas auxiliares. Insertando la representación del operador físico en la definición de la función de Green,

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^{<}(t-t') &= i \langle f_{j\sigma}^{\dagger}(t') b(t') b^{\dagger}(t) f_{i\sigma}(t) \rangle \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^{<}(t-t') &\stackrel{NCA}{=} i \langle f_{j\sigma}^{\dagger}(t') f_{i\sigma}(t) \rangle \langle b(t') b^{\dagger}(t) \rangle, \end{aligned}$$

donde la última factorización es válida dentro de la NCA. Introduciendo las funciones de Green de las partículas auxiliares

$$\begin{aligned} G_{ij,\sigma}^{<}(t-t') &= +i \langle f_{j\sigma}^{\dagger}(t') f_{i\sigma}(t) \rangle, \\ G_{ij,\sigma}^{>}(t-t') &= -i \langle f_{i\sigma}(t) f_{j\sigma}^{\dagger}(t') \rangle, \\ D^{<}(t-t') &= -i \langle b^{\dagger}(t') b(t) \rangle, \\ D^{>}(t-t') &= -i \langle b(t) b^{\dagger}(t') \rangle, \end{aligned}$$

las funciones de Green físicas resultan

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^{<}(t-t') &\stackrel{NCA}{=} i G_{ij,\sigma}^{<}(t-t') D^{>}(t'-t), \\ G_{ij,\sigma}^{>}(t-t') &\stackrel{NCA}{=} i D^{<}(t'-t) G_{ij,\sigma}^{>}(t-t'). \end{aligned}$$

El problema es ahora calcular $G_{ij,\sigma}^{>}$, $G_{ij,\sigma}^{<}$, $D^{>}$ y $D^{<}$. Una vez que están determinadas, el propagador físico se puede encontrar como una convolución

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^{<}(\omega) &= i \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_{ij,\sigma}^{<}(\omega' + \omega) D^{>}(\omega'), \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^{>}(\omega) &= i \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_{ij,\sigma}^{>}(\omega' + \omega) D^{<}(\omega'). \end{aligned}$$

El esquema auto-consistente en NCA

El esquema de cálculo en NCA es el siguiente: A una temperatura y voltaje dado

- 1ro Se realiza una propuesta inicial de $G_{ii,\sigma}^{\lessgtr}$ y D^{\lessgtr} . Estas se utilizan para el cálculo de las auto-energías del pseudo-fermión $\Sigma_{ii,\sigma}^{\lessgtr}$ y para el bosón de Π^{\lessgtr} .
- 2do Se realiza una transformación para obtener las auto-energías retardadas y avanzadas $\Sigma_{ii,\sigma}^{r,a}$ y $\Pi^{r,a}$ a partir de la mayor.
- 3ro Las funciones de Green retardadas y avanzadas para las partículas auxiliares $G_{ij,\sigma}^{r,a}$ y $D^{r,a}$, se pueden obtener a partir de las ecuaciones de Dyson.
- 4to Usando las funciones de Green avanzadas y retardadas junto con las auto-energías mayores y menores, $G_{ij,\sigma}^{\lessgtr}$ pueden ser recalculadas para iniciar el proceso de nuevo hasta que haya convergencia.

1ro- Las auto-energías menores y mayores

Como se explica en el **Apéndice C** la expansión diagramática fuera de equilibrio para las funciones de Green conduce a los diagramas de auto-energía menor que se muestran en la Fig. 5.3. Corresponden a los pseudo-fermiones y al bosón esclavo respectivamente.

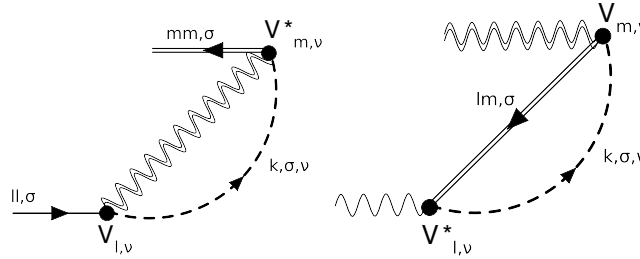


Figura 5.3: Auto-energías que corrigen al pseudo-fermión (izquierda) y al bosón esclavo (derecha) en la aproximación non-crossing.

La auto-consistencia de la NCA viene del hecho de que la función de Green de bosón vestido es necesaria para calcular la auto-energía del pseudo-fermión y también la función de Green del pseudo-fermión vestido entra en la auto-energía del bosón esclavo. Este es un punto clave: en la auto-energía del bosón, el índice interno i para el nivel y σ para el espín están sumados, así que toda la información de los pseudo-fermiones (y por tanto las posibles ocupaciones) están tenidas en cuenta. El bosón esclavo actúa como un **portador de información**, una partícula mediadora entre los estados posibles. Es así como surgen los efectos de interferencia considerados en el modelo dentro de NCA.

Las expresiones analíticas para los auto-energías son

$$\begin{aligned}\Sigma_{lm,\sigma}^<(\omega) &= i \sum_{k\nu} V_{\nu l} V_{\nu m}^* \int \frac{d\omega'}{2\pi} g_{kk,\nu\sigma}^<(\omega - \omega') D^<(\omega'), \\ \Pi^<(\omega) &= -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{k\nu\sigma,lm} V_{\nu l} V_{\nu m}^* g_{kk,\nu\sigma}^>(\omega' - \omega) G_{ml,\sigma}^<(\omega').\end{aligned}$$

Las auto-energías mayores se pueden obtener intercambiando $<\rightarrow>$. Una de las características de la NCA es que no hay correcciones a los electrones de conducción. Por lo tanto, las funciones de Green mayores y menores que son necesarias, son las desnudas. Estas están relacionadas con las propiedades de los reservorios:

$$\begin{aligned}g_{kk,\nu\sigma}^>(\omega) &= -2\pi i (1 - f_\nu(\omega)) \delta(\omega - \epsilon_{k\nu\sigma}) \\ g_{kk,\nu\sigma}^<(\omega) &= 2\pi i f_\nu(\omega) \delta(\omega - \epsilon_{k\nu\sigma}).\end{aligned}$$

Teniendo esto en cuenta y considerando la definición de la matriz de hibridación

$$\begin{aligned}\Sigma_{lm,\sigma}^<(\omega) &= - \sum_{\nu} \Gamma_{lm,\sigma}^{\nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} f_\nu(\omega - \omega') D^<(\omega'), \\ \Pi^<(\omega) &= - \sum_{\nu\sigma,lm} \Gamma_{lm,\sigma}^{\nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - f_\nu(\omega' - \omega)) G_{ml,\sigma}^<(\omega'), \\ \Sigma_{lm,\sigma}^>(\omega) &= \sum_{k\nu} \Gamma_{lm,\sigma}^{\nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - f_\nu(\omega - \omega')) D^>(\omega'), \\ \Pi^>(\omega) &= \sum_{k\nu\sigma,lm} \Gamma_{lm,\sigma}^{\nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} f_\nu(\omega' - \omega) G_{ml,\sigma}^>(\omega').\end{aligned}$$

2do- Las auto-energías retardadas y avanzadas

Es posible obtener las auto-energías retardadas y avanzadas haciendo la transformación siguiente

$$\begin{aligned}\Sigma_{ij,\sigma}^r(\omega) &= i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Sigma_{ij,\sigma}^>(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}, \\ \Pi^r(\omega) &= i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Pi^>(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta},\end{aligned}$$

donde $\eta \rightarrow 0^+$. Esto se basa en el hecho de que, debido a la restricción de $Q = 1$, la contribución de la mayor es la única que importa (la contribución de la menor se hace cero en el subespacio de $Q = 1$).

3ro- Funciones de Green retardadas y avanzadas

Las funciones de Green retardadas y avanzadas satisfacen la ecuación de Dyson matricial,

$$\mathbf{G}^{r,a} = \mathbf{g}^{r,a} + \mathbf{g}^{r,a} \Sigma^{r,a} \mathbf{G}^{r,a},$$

donde trabajando explícitamente esta expresión y usando las funciones de Green no perturbadas $(g_{11,\sigma}^r)^{-1} = \omega - E_1 - \lambda$ y $(g_{22,\sigma}^r)^{-1} = \omega - E_2 - \lambda$,

$$\begin{aligned} G_{11,\sigma}^r &= \frac{1}{\mathbb{D}}(\omega - E_2 - \lambda - \Sigma_{22,\sigma}^r), \\ G_{12,\sigma}^r &= \frac{1}{\mathbb{D}}(\Sigma_{12,\sigma}^r), \\ G_{21,\sigma}^r &= \frac{1}{\mathbb{D}}(\Sigma_{21,\sigma}^r), \\ G_{22,\sigma}^r &= \frac{1}{\mathbb{D}}(\omega - E_1 - \lambda - \Sigma_{11,\sigma}^r), \end{aligned}$$

donde $\mathbb{D} = (\omega - E_1 - \lambda - \Sigma_{11,\sigma}^r)(\omega - E_2 - \lambda - \Sigma_{22,\sigma}^r) - \Sigma_{12,\sigma}^r \Sigma_{21,\sigma}^r$. La ecuación para las funciones de Green avanzadas son las mismas cambiando $r \rightarrow a$.

Para el bosón es más sencillo ya que no hay una estructura de matriz,

$$D^{r,a}(\omega) = \frac{1}{\omega - E_0 - \lambda - \Pi^{r,a}},$$

donde $E_0 = 0$.

4to- Las relaciones constitutivas

Los funciones de Green de no-equilibrio menores y mayores satisfacen la ecuación de Dyson

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{g}^< + (\mathbf{g}\Sigma\mathbf{G})^<,$$

donde la componente menor del producto de matrices se puede determinar explícitamente gracias al teorema de Langreth,

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{g}^< + \mathbf{g}^<\Sigma^a\mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r\Sigma^<\mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r\Sigma^r\mathbf{G}^<.$$

Se puede demostrar que en el régimen estacionario, donde toda la información acerca de la ocupación antes de conectar a los cables se pierde ³,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{\leq} &= \mathbf{G}^r\Sigma^{\leq}\mathbf{G}^a, \\ \mathbf{D}^{\leq} &= \mathbf{D}^r\Pi^{\leq}\mathbf{D}^a, \end{aligned}$$

Así, el bucle está cerrado y puede repetirse hasta que haya convergencia.

La proyección sobre el subespacio físico $Q = 1$

Las funciones de Green que se determinan de este modo dependen de λ . En el **Apéndice B** se discute el proceso mediante el cual se puede proyectar sobre el subespacio con el número correcto de partículas auxiliares $Q = 1$. Para esto es preciso tomar el límite $\lambda \rightarrow \infty$. Nosotros elegimos tomar este límite como se discute en la Ref. [Kroha and Wölfle \[1998\]](#) que permite una gran precisión a temperaturas bajas.

³Ver demostración en el **Apéndice C**

5.5. Conservación de la corriente

Aquí presento una demostración de que la corriente establecida en el cable izquierdo, entre el reservorio y la región central, I_L es la misma que la corriente que fluye desde esta región al reservorio de la derecha I_R dentro de la NCA. Por simplicidad asumimos que no hay ningún campo magnético aplicado. La demostración se puede extender fácilmente para el caso de espines no equivalentes. Sumando ambos espines las expresiones de las corrientes son

$$I_L = \frac{2ie}{h} \int d\omega \text{Tr}\{\Gamma^L[f_L(\omega)\mathbf{G}_d^>(\omega) + (1 - f_L(\omega))\mathbf{G}_d^<(\omega)]\}, \quad (5.4)$$

$$I_R = \frac{-2ie}{h} \int d\omega \text{Tr}\{\Gamma^L[f_L(\omega)\mathbf{G}_d^>(\omega) + (1 - f_L(\omega))\mathbf{G}_d^<(\omega)]\}, \quad (5.5)$$

donde las funciones de Green físicas pueden ser reemplazados por sus expresiones en términos de las funciones de Green para las partículas auxiliares. Denotando \mathbf{G} las matrices de 2×2 con las funciones de Green de pseudo-fermiones para un dado espín,

$$I_L = -\frac{2e}{h} \int d\omega \int \frac{d\omega'}{2\pi Q} f_L(\omega) D^<(\omega') \text{Tr} \left[\Gamma^L \mathbf{G}^>(\omega' + \omega) \right] \\ + (1 - f_L(\omega)) D^>(\omega') \text{Tr} \left[\Gamma^L \mathbf{G}^<(\omega' + \omega) \right] \quad (5.6)$$

$$I_R = \frac{2e}{h} \int d\omega \int \frac{d\omega'}{2\pi Q} f_R(\omega) D^<(\omega') \text{Tr} \left[\Gamma^R \mathbf{G}^>(\omega' + \omega) \right] \\ + (1 - f_R(\omega)) D^>(\omega') \text{Tr} \left[\Gamma^R \mathbf{G}^<(\omega' + \omega) \right]. \quad (5.7)$$

Usando la expresión para la auto-energía bosónica y después de un poco de álgebra, la diferencia entre ambas expresiones se convierte en

$$I_L - I_R = \frac{-e}{h} \int \frac{d\omega'}{Q} [D^<(\omega') \Pi^>(\omega') - D^>(\omega') \Pi^<(\omega')], \quad (5.8)$$

donde es fácil ver que se hace cero usando $D^{\lessgtr} = D^r \Pi^{\lessgtr} D^a$.

Explorando el Kondo SU(2) y SU(4)

6.1 El efecto Kondo SU(2).

6.2 El efecto Kondo SU(4).

6.3 SU(4) con rotura de simetría.

6.4 Derivación variacional de la temperatura de Kondo.

El último capítulo presenté nuestro modelo efectivo que tiene como objetivo describir las propiedades de transporte de los sistemas nanoscópicos que muestran efectos de interferencia. El modelo Aligia es una generalización del modelo de Anderson considerando dos dobletes acoplados a un par de cables fuente-sumidero, donde uno de los acoplamientos es complejo. La fase tiene en cuenta la posible simetría diferente de los dos estados de muchos cuerpos descritos en este modelo efectivo de baja energía y en este sentido es similar a la diferencia de fase entre los posibles caminos en una descripción Feynmaniana.

El modelo de Anderson se introdujo originalmente para describir un problema diferente: el efecto de las impurezas magnéticas con orbitales localizados d o f en un metal [Anderson, 1961] [Hewson and Meyer, 2002]. A pesar de su propósito original, este modelo ha sido muy exitoso para describir los problemas de transporte en sistemas donde el confinamiento de electrones da lugar a niveles de energía discretos [Meir and Wingreen, 1991] [Meir et al., 1993]. En estos sistemas los electrones de los cables son como los electrones de conducción en el metal, los niveles localizados son como los orbitales en la impureza magnética y la repulsión de Coulomb resultante del tamaño finito de la región confinada es como la interacción entre los electrones que tratan de ocupar el mismo orbital. El primer efecto de la hibridación entre los niveles localizados y los electrones de conducción es que los estados localizados adquieren una vida media finita. Los electrones pueden salir de la impureza hacia la banda de conducción vaciando el estado localizado. El problema de un solo nivel que se hibrida con un continuo de estados es el problema del nivel resonante discutido en la Sec. A.3 del **Apéndice A**. La inversa de la vida media es el ancho del nivel resonante Δ , dado por $\Delta = \pi \rho_0 V^2$, donde V es la amplitud del acoplamiento y ρ_0 es la densidad de estados de los electrones de conducción en el nivel de Fermi.

Hay un segundo efecto más atractivo que tiene que ver con los grados de libertad internos del nivel localizado. En el caso de un nivel localizado que tiene degeneración de espín, cuando su energía E_d está muy por debajo del nivel de Fermi de los cables E_F , éste puede ser ocupado por un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo. Si la repulsión de Coulomb U es lo suficientemente fuerte, sólo hay un electrón. Este régimen en el que $E_F - E_d \gg \Delta$ y $E_d + U - E_F \gg \Delta$, donde $\langle n_d \rangle \sim 1$ es el régimen de Kondo. A pesar del costo de energía, hay procesos virtuales en los que el electrón en el nivel localizado tunelea a la banda de conducción y otro electrón ocupa el vacío dejado haciéndolo eventualmente con un espín diferente. Como resultado de este proceso, hay una inversión de espín. Estos procesos de inversión de espín producen correlaciones entre los electrones localizados y los electrones de conducción. A bajas temperaturas, en virtud de todos los posibles procesos de inversión de espín, el sistema gana energía por la formación de un estado de muchos cuerpos singlete. Este es el **efecto Kondo**. El estado formado por debajo de una temperatura característica llamada la temperatura de Kondo T_K entrelaza a los electrones de conducción (sobre todo aquellos con energías cercanas al nivel de Fermi) y los electrones localizados. Dado que el espín localizado está la mitad del tiempo hacia arriba y la mitad del tiempo hacia abajo, el magnetismo se ve apantallado por los electrones de conducción. Como consecuencia de la probabilidad finita de encontrar el electrón localizado en el nivel de Fermi, la manifestación del efecto Kondo es un aumento en la densidad de estados de la impureza en el nivel de Fermi. El pico observado se llama la resonancia Kondo. La ancho de la resonancia está relacionado con T_K .

En las propiedades de transporte de los metales el efecto de las impurezas magnéticas es aumentar la resistividad por debajo de la temperatura de Kondo [Kondo, 1964]. La correlación entre los electrones localizados y los de conducción es un mecanismo de dispersión muy efectivo por debajo de T_K . Contrariamente, en los sistemas **nanoscópicos** el aumento de la densidad local de estados tiene consecuencias muy interesantes [Ng and Lee, 1988] [Glazman and Raikh, 1988] [Meir et al., 1993]. Puesto que la corriente a bajas temperaturas y voltajes es casi proporcional a la densidad de estados en el nivel de Fermi, el desarrollo de la resonancia Kondo se observa como un aumento de la conductancia hasta el límite ideal $2e^2/h$. En el estado entrelazado, los electrones cerca del nivel de Fermi en el cable de la fuente pueden pasar a través del nivel localizado al cable del sumidero aún fuera de la condición de resonancia por medio de un proceso virtual de inversión de espín. Después de las realizaciones experimentales del efecto Kondo en puntos cuánticos semiconductores [Goldhaber-Gordon et al., 1998b] [Goldhaber-Gordon et al., 1998a] [Cronenwett et al., 1998] [van der Wiel et al., 2000], Kouwenhoven y Glazman llamaron a la ocurrencia de este efecto en el transporte mesoscópico “el renacimiento del efecto Kondo”. Y de hecho se ha observado en una gran cantidad de sistemas diferentes.

Nuestro modelo es una generalización del modelo de Anderson para incluir dos dobletes. Como se discutió en el **Capítulo 5**, estos representan de

forma efectiva dos niveles de muchos cuerpos localizados con $N \pm 1$ electrones que están casi degenerados con un nivel singlete con N electrones. El acoplamiento complejo de uno de estos niveles a los cables tiene en cuenta la posible diferencia de fase en el transporte a través de ambos estados y permite describir fenómenos de interferencia. En esta imagen efectiva sólo hay un electrón (o hueco) a la vez en el sistema, que es como una repulsión de Coulomb infinita en el modelo de Anderson. Por lo tanto, como consecuencia de las correlaciones fuertes nuestro modelo de interferencia también es adecuado para tener en cuenta el efecto Kondo. Por otra parte, además del espín también hay un grado de libertad **orbital**: un electrón puede tunelar de los cables con espín hacia arriba o hacia abajo y ocupar un nivel u otro. Hay correlaciones orbitales y de espín que conducen a un efecto Kondo más robusto. En comparación con el modelo de Anderson que describe un espín $1/2$ (o un doblete localizado) hibridado con los electrones de conducción que tiene simetría SU(2)¹, cuando ambos dobletes están degenerados, todos los acoplamientos tienen el mismo módulo y la fase es π , nuestro modelo tiene simetría SU(4). En el régimen de Kondo, los procesos virtuales entrelazan electrones localizados y de conducción con respecto al espín y al grado de libertad orbital [Borda et al., 2003]. El papel de las correlaciones orbitales se ha explorado en experimentos de dos puntos cuánticos [Wilhelm et al., 2002] [Pohjola et al., 2001] [Holleitner et al., 2002] [Chen et al., 2004] [Okazaki et al., 2011] y ha habido realizaciones del efecto Kondo SU(4) en nanotubos de carbono [Jarillo-Herrero et al., 2005] y transistores de átomos individuales formadas en nanocables de Si [Tettamanzi et al., 2012]. Muy recientemente también en QD semiconductores [Keller et al., 2014].

En este capítulo se muestra cómo tanto el efecto Kondo SU(2) y SU(4) pueden ser explorados dentro de nuestro modelo y se discuten las características más relevantes de cada caso. Los resultados presentados corresponden al caso de equilibrio. Las propiedades de transporte que muestran la interrelación entre el efecto Kondo y la interferencia cuántica se presentan en el **Capítulo 7**.

6.1. El efecto Kondo SU(2)

Comenzando con el modelo Aligia que se muestra en la Fig. 5.1, considero en primer lugar el caso en el que uno de los dobletes está desacoplado de los cables conductores. Como se muestra en la Fig. 6.1, el modelo describe sólo un doblete con energía $E_1 = E_d$ hibridado con los cables a izquierda y derecha.

Puesto que los acoplamientos son proporcionales en este límite, el transporte en respuesta lineal está dado esencialmente por la densidad de estados evaluada en el nivel de Fermi. Antes de hablar de las propiedades de transporte, es conveniente entender el comportamiento de la densidad local

¹Todas las operaciones de simetría representadas por matrices unitarias de 2×2 con determinante igual a 1

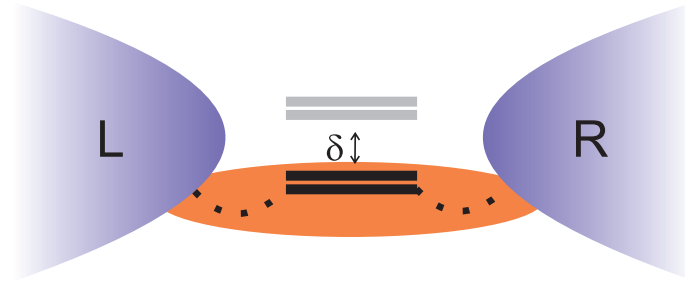


Figura 6.1: Esquema del modelo de Aligia en el caso en que uno de los dobletes se desacopla de los contactos.

de estados.

El Hamiltoniano efectivo en este límite es

$$H^{SU(2)} = \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k \sigma}^{\dagger} c_{\nu k \sigma} + \sum_{\nu k \sigma} (V_{\nu} d_{\sigma}^{\dagger} c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}),$$

donde d_{σ}^{\dagger} es el operador de la creación del estado localizado, $c_{\nu k \sigma}^{\dagger}$ crea estados de conducción en la izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$), y V_{ν} describe los elementos de salto entre los cables y el doblete, supuestos independientes de k . Trabajamos en el límite de repulsión de Coulomb U infinita.

Como se acostumbra, todos los parámetros se dan en términos del ancho del nivel resonante Δ que corresponde al ancho mitad a la mitad del máximo de la densidad local de estados en ausencia de interacciones. El nivel localizado se hibrida con una combinación lineal $c_{kL\sigma}^{\dagger} + c_{kR\sigma}^{\dagger}$ de los estados de conducción en los cables izquierdo y derecho (la diferencia está desacoplada del Hamiltoniano). En este caso el ancho nivel resonante es $\Delta = \Delta_L + \Delta_R = \pi(\rho_{L0} V_L^2 + \rho_{R0} V_R^2) = 1$, la unidad de energía. Aquí ρ_{L0} (ρ_{R0}) es la densidad de estados de los electrones de conducción en la izquierda (derecha). Tomamos $E_d = -4$, $E_F = 0$ y la mitad del ancho de banda $D = 10$ ($\rho_0 = 1/2D$) para estar en el régimen de Kondo. La densidad local de estados a diferentes temperaturas se puede calcular con la aproximación *non-crossing* (NCA) [Tosi, 2010], como se indica en la Sec. 5.4. El resultado se muestra en la Fig. 6.2.

Hay dos picos en la densidad de estados. Uno de los picos se encuentra en $\omega = E_d$ y corresponde a la energía necesaria para arrancar un electrón del nivel localizado y ponerlo en el nivel de Fermi. Si se aísla el nivel, la única contribución esperada a la densidad de estados sería una delta de Dirac en esta energía. Como consecuencia de la mezcla con el continuo de estados de conducción, el pico adquiere un ancho: un electrón en el nivel localizado tiene una vida media finita, ya que puede escapar hacia los cables. De la figura, el ancho mitad es 2Δ . Se puede observar en el *recuadro interior* (línea discontinua roja) que el pico llamado de transferencia de carga es la única contribución a la densidad de estados a temperaturas altas. A medida que T disminuye otro pico aparece en la densidad de estados cerca de $\omega = 0 = \epsilon_F$. Esta es la resonancia Kondo, una característica distintiva del efecto Kondo.

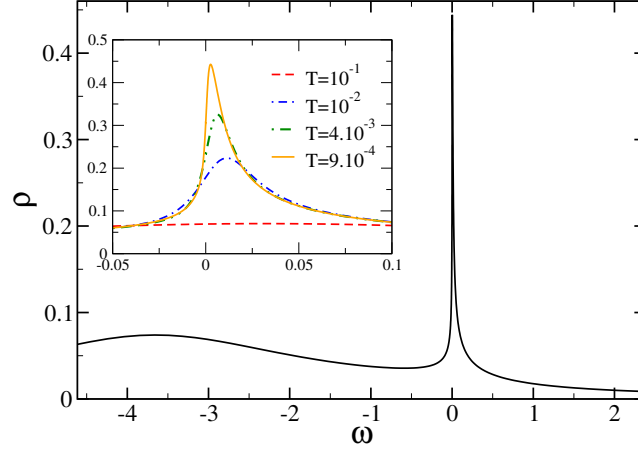


Figura 6.2: Densidad de estados correspondientes al nivel localizado en el límite de simetría SU(2). La energía del nivel $E_d = -4$ está muy por debajo del nivel de Fermi. A baja temperatura $T = 5 \cdot 10^{-4}$, el efecto Kondo se desarrolla y hay un pico cerca de $\omega \sim 0$ además del de transferencia de carga pico en $\omega = E_d$. En el recuadro interior se muestra un zoom de la resonancia Kondo para diferentes temperaturas.

El problema de Kondo puede resolverse exactamente con el Bethe Ansatz [Wiegmann, 1980] [Kawayami and Okiji, 1981] [Okiji and Kawakami, 1983] y con mucha precisión con el grupo de renormalización numérica (NRG) [Wilson, 1975] [Costi et al., 1994]. El proceso de renormalización muestra que sólo hay una escala relevante a bajas temperaturas: la temperatura de Kondo [Anderson, 1961] [Haldane, 1978b]. La expresión analítica para T_K para el modelo Anderson SU(N) (degeneración N) para repulsión de Coulomb infinita es [Hewson, 1997]

$$T_K = D \left(\frac{N\Delta}{D} \right)^{\frac{1}{N}} e^{\frac{-\pi|E_d|}{N\Delta}}, \quad (6.1)$$

que depende exponencialmente de la energía del nivel localizado, de la hibridación y de la degeneración. Esto es muy importante ya que el efecto Kondo no puede ser estudiado con perturbaciones en el acoplamiento V (como ocurre también con la superconductividad). La NCA reproduce bien la física de Kondo, ya que incluye procesos de todos los órdenes en el acoplamiento, es decir, es una expansión diagramática no perturbativa.

De esta expresión analítica, $T_K^{exacta} = 0.0083$ para nuestros parámetros ($N = 2$, $E_d = -4$, $\Delta = 1$ y $D = 10$). Esto puede ser comparado con el ancho de la resonancia Kondo. De hecho, la mitad del ancho a mitad del máximo da $T_K^{HWHM} = 0.009$, que se encuentra en muy buen acuerdo teniendo en cuenta que la definición de T_K depende de la propiedad que se estudia. Las diferentes definiciones difieren en un factor del orden de 1 [Tosi et al., 2012b].

Otro punto importante con respecto al efecto Kondo es que una vez que el momento magnético ha sido apantallado, el estado fundamental es un líquido de Fermi. Correspondientemente, satisface ciertas leyes y relaciones.

Entre ellas, la regla de suma de Friedel establece lo que debe ser el valor de la densidad de estados en el nivel de Fermi a $T = 0$ [Langreth, 1966]. Para Δ y ρ_0 independientes de la frecuencia, esta regla resulta

$$\rho_\sigma(\epsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2(\pi\langle n_\sigma \rangle), \quad (6.2)$$

donde $\langle n_\sigma \rangle$ es la ocupación media de espín σ . En el régimen de Kondo, $\langle n_\sigma \rangle \sim 0.5$ dado que el estado está la mitad de tiempo con espín hacia arriba y la mitad hacia abajo. Por lo tanto, el límite de $\rho_\sigma(\epsilon_F)\pi\Delta_\sigma \sim 1$ se tiene que cumplir según la regla de suma de Friedel. A partir del resultado de la NCA en la Fig. 6.2, $\rho(0) = 0.323$, es decir, $\rho(\epsilon_F)\pi\Delta = 1.014$. Una de las críticas más extendida a la NCA es que no satisface la regla de suma de Friedel [Coleman, 1984] [Brickers et al., 1987] [Kroha and Wölfle, 1998] [Kroha and Wölfle, 1998]. La violación de la regla de suma de Friedel se produce a temperaturas muy bajas [Costi et al., 1995]. La NCA da el resultado hasta $T = 0.1 T_K$. En este caso, el resultado corresponde a $T = 0.06 T_K$. Hay una sobreestimación de 2%.

En la Fig. 6.3, el resultado de la densidad de estados del nivel localizado se muestra para los mismos parámetros pero $\Delta = 0.5$.

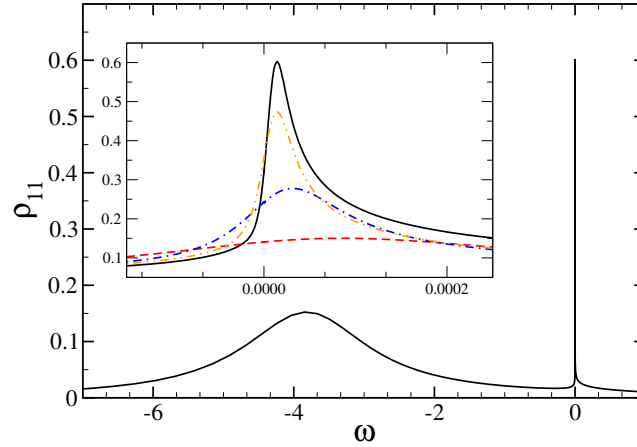


Figura 6.3: Densidad de estados local en el límite de simetría SU(2). Al igual que antes, $E_d = -4$, pero $\Delta = 0.5$ y $T = 5 \cdot 10^{-6}$.

Se puede observar que la resonancia Kondo es mucho más estrecha. La temperatura de Kondo depende exponencialmente de Δ , por lo tanto la reducción de la hibridación a la mitad produce un fuerte debilitamiento del efecto Kondo. Este hecho fue un reto inicial para la realización experimental del efecto Kondo en puntos cuánticos. Con el fin de tener una gran repulsión de Coulomb los puntos tienen que ser muy pequeños con electrones confinados usando grandes tensiones electrostáticas. Pero como consecuencia las barreras túnel con la fuente y el sumidero resultaban muy resistentes lo que conduce a una temperatura de Kondo muy baja, inalcanzable en el laboratorio.

Para nuestros parámetros la temperatura de Kondo da $T_K^{exacta} = 1.1 \cdot 10^{-5}$. La curva de la figura corresponde a $T = 0.45T_K$. Del pico de resonancia, $T_K^{HWHM} = 3.08 \cdot 10^{-05}$, que es del orden de magnitud correcto pero tres veces más grande. Esto es debido a que el ancho de la resonancia Kondo corresponde a T_K para bajas temperaturas $T \rightarrow 0$. La densidad de estados en el nivel de Fermi $\rho(0) = 0.32$, es decir, $\rho(\epsilon_F)\pi\Delta = 1.005$. La sobreestimación es mucho menor, apenas 0.5 %.

Con respecto a las propiedades de transporte de uno de los supuestos comunes es considerar que la densidad de estados no se modifica fuera de equilibrio. Si esta suposición se mantiene, las propiedades de transporte se pueden obtener a partir de información en equilibrio en un enfoque de respuesta lineal. Según nuestros cálculos, esto es cierto sólo para voltajes muy pequeños. En la Fig. 6.4 la densidad de estados fuera de equilibrio se muestra para diferentes voltajes aplicados. La energía del nivel localizado es $E_d = -4$ y $\Delta = 1$. Se considera que las caídas de tensión son simétricas, $\mu_L = eV_{bias}/2$ y $\mu_R = -eV_{bias}/2$.

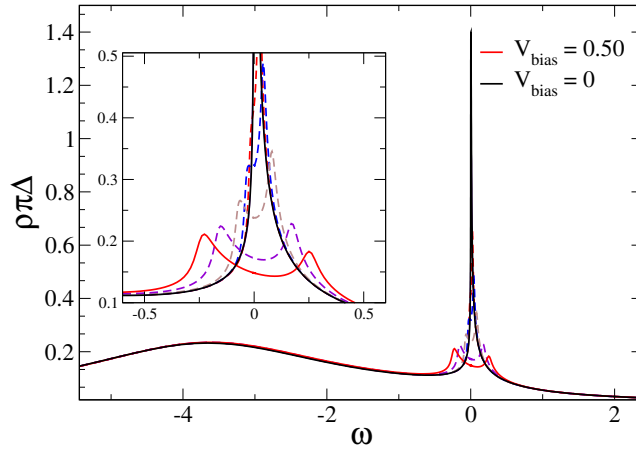


Figura 6.4: Densidad de estados del nivel localizado calculada fuera de equilibrio para diferentes voltajes. La energía del nivel es $E_d = -4$, la mitad del ancho de banda es $D = 10$ y $T = 0.005 T_K$. El sistema está en el régimen de Kondo. La resonancia Kondo se desdobra ya que los electrones de conducción en los reservorios a izquierda y derecha termalizan a diferentes potenciales electro-químicos compatibles con la caída de tensión.

Se puede observar en la figura que el pico de Kondo se desdobra fuera de equilibrio [Meir et al., 1993] [Wingreen and Meir, 1994]. Los electrones de conducción procedentes de los cables izquierdo y derecho se hibridan por separado con el nivel localizado dando lugar a dos resonancias. En el recuadro interior que hay un zoom a la región cerca de $\omega = \epsilon_F = 0$. Las resonancias se ubican en $\pm eV_{bias}/2$, de acuerdo con los potenciales químicos. El pico de transferencia de carga en $\omega = E_d$ no se modifica por el voltaje.

Este análisis muestra que el procedimiento apropiado para las propiedades de transporte es calcular la corriente usando las funciones de Green de no equilibrio. La conductancia diferencial dI/dV se puede encontrar mediante una derivación numérica. Los resultados obtenidos de esta manera

para diferentes temperaturas se muestran en la Fig. 6.5.

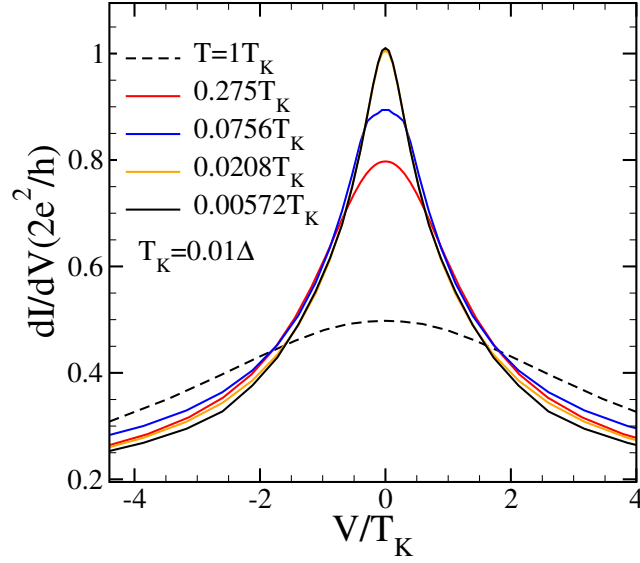


Figura 6.5: Conductancia diferencial dI/dV calculada a diferentes temperaturas como una función del voltaje escalado con la temperatura de Kondo V/T_K . Parámetros: $E_d = -4$, $D = 10$, $\Delta = 1$.

Las curvas tienen forma Lorentziana, con un máximo a $V_{bias} = 0$. Esta anomalía a voltaje cero en la conductancia diferencial se observó en los experimentos como una firma del efecto Kondo [Goldhaber-Gordon et al., 1998a] [Cronenwett et al., 1998] [van der Wiel et al., 2000]. Es digno de señalar que el incremento de la corriente se produce en un rango de parámetros en los que el transporte está suprimido por el bloqueo de Coulomb. Dado que un electrón está ocupando el nivel localizado y el costo de la energía para un electrón adicional es la gran repulsión de Coulomb U , la corriente es despreciablemente pequeña. El incremento de la conductancia por debajo de T_K es una consecuencia de la naturaleza de la función de onda de muchos cuerpos en el estado Kondo que supera el bloqueo.

El ancho del pico de voltaje cero está relacionado con la temperatura de Kondo a muy bajas temperaturas [Nagaoka et al., 2002]. El eje de tensión en la figura ha sido escalado apropiadamente para enfatizar esto. El aumento de la conductancia se pierde tan pronto $eV_b \sim T_K$, es decir, tan pronto como el desdoblamiento de la resonancia Kondo es del orden de T_K . Se puede observar en la figura que el máximo del pico aumenta con la temperatura y alcanza la conductancia ideal $2e^2/h$ [Ng and Lee, 1988] [Glazman and Raikh, 1988]. Esta es una consecuencia del líquido de Fermi como estado fundamental. Dado que el valor de la densidad de estados en el nivel de Fermi está fijada por la regla de suma de Friedel (Ec. (6.2)) se puede demostrar ² que esto lleva a e^2/h por espín en el caso de acoplamiento simétrico con fuente y sumidero. En la Fig. 6.6 la conductancia de equilibrio G que

²Como en el ejemplo de los tres puntos cuánticos estudiado en el **Capítulo 4**

se obtiene de evaluar $dI/dV|_{V=0}$ se muestra como función de la temperatura escalada con T_K con cuadrados rojos. Esto es importante porque como T_K es la única escala relevante en el régimen de Kondo, las propiedades de transporte se pueden describir con funciones universales [Wilson, 1975] de T/T_K .

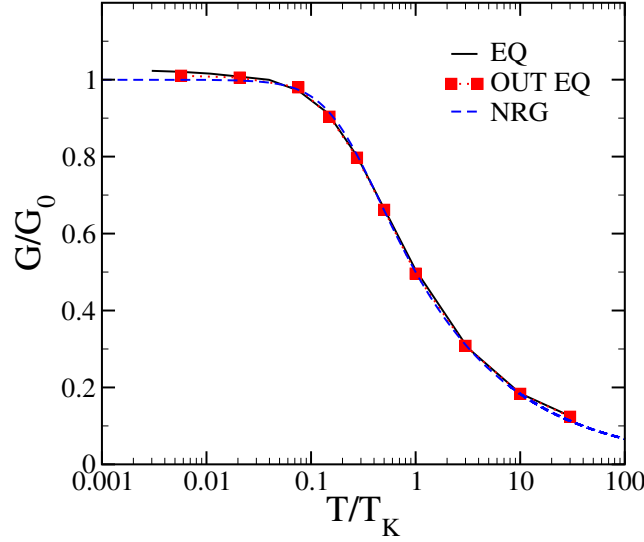


Figura 6.6: Conductancia como una función de T/T_K obtenida en el régimen de respuesta lineal (línea continua negra) y a partir de la conductancia diferencial evaluada a voltaje cero (puntos rojos). Los parámetros son: $E_d = -4$, $D = 10$. El resultado empírico para espín 1/2 obtenido con el NRG también se muestra con una línea discontinua azul. Aquí, $G_0 = 2e^2/h$. Se puede observar que el resultado de la NCA concuerda muy bien con el NRG hasta $T = 0.1 T_K$. Por debajo de esta temperatura, la NCA viola regla suma de Friedel y sobreestima la conductancia.

Los resultados obtenidos pueden compararse con la conductancia obtenida en respuesta lineal (línea de color negro continua) que de la Ec. (3.36) se convierte en

$$G = \frac{e^2}{h} 2\pi \int d\omega \left(-\frac{\partial f}{\partial \omega} \right)_{eq} Tr \{ \Gamma(\omega) \rho^{eq}(\omega) \} \sim \frac{e^2}{h} (2\pi) 2 \frac{\Delta}{2} \rho^{eq}(0),$$

luego $G \sim \frac{2e^2}{h} (\pi\Delta) \rho^{eq}(0)$ que da el límite unitario de $G = \frac{2e^2}{h}$ a temperatura cero de acuerdo con la regla de suma de Friedel. En muchos casos es suficiente trabajar con respuesta lineal y utilizar los resultados calculados en equilibrio. Se puede observar que el procedimiento más general da los mismos resultados.

La fórmula empírica obtenida con el NRG

$$G^{NRG}(T) = \frac{G(0)}{[1 + (2^{1/s} - 1)(T/T_K)^2]^s},$$

también se muestra en la figura con línea de trazos. El valor de $s = 0.21$ corresponde a espín 1/2. Esta expresión ha demostrado un muy buen acuerdo

con los experimentos [Grobis et al., 2008]. El resultado fuera de equilibrio de la NCA coincide con el resultado del NRG en muchas décadas de temperatura. No sólo los valores son correctos, sino también la dependencia funcional. La NCA reproduce el comportamiento universal correcto en el régimen de Kondo [Bas, 2010]. Debajo de $T = 0.1 T_K$, la violación de la regla de suma de Friedel conduce a una ligera sobreestimación de la conductancia.

También es interesante estudiar las propiedades de transporte a medida que la energía del nivel localizado E_d se controla con una tensión de compuerta electrostática V_g , $eV_g = -E_d$. Diferentes regímenes pueden ser explorados en función de la posición de E_d con respecto al nivel de Fermi. El análisis a $T = 0$ sería el siguiente: si E_d está por encima del nivel de Fermi, la ocupación media del nivel es cero y no hay conductancia. Una vez que el nivel localizado está cerca de E_F , $E_d - E_F \sim \Delta$, la conductancia comienza a aumentar (la ocupación fluctúa entre 0 y 1), hasta alcanzar el valor de $2e^2/h$ cuando el nivel está en resonancia $E_d = E_F$. Cuando el nivel se mueve debajo del nivel de Fermi, la ocupación es cercana a la unidad de manera que el nivel siempre está ocupado y la conductancia no disminuye debido al efecto Kondo. En el caso de repulsión de Coulomb finita U , existe una meseta de conductancia hasta $E_d + U - E_F \sim \Delta$ donde la ocupación de nuevo fluctúa entre uno y dos. La conductancia disminuye después de la condición de resonancia $E_d + U = 0$ en la que dos electrones comparten el nivel localizado [van der Wiel et al., 2000].

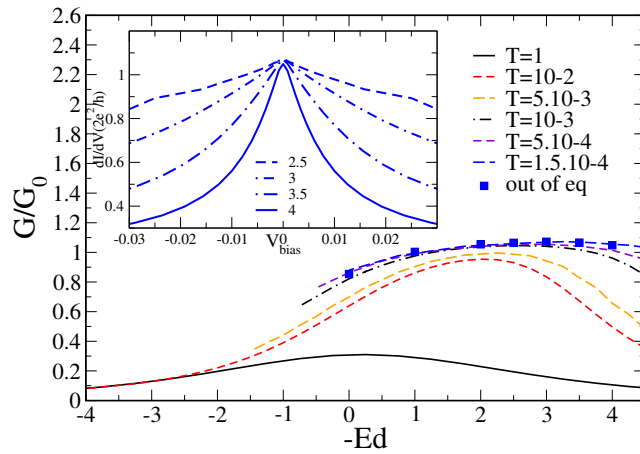


Figura 6.7: Conductancia como función del voltaje de compuerta $eV_g = -E_d$. Las curvas de trazos corresponden al régimen de respuesta lineal, mientras que los cuadrados azules son el resultado de la conductancia diferencial evaluada a voltaje cero. En la panel interior se muestran las curvas dI/dV vs V_{bias} para los distintos valores de voltaje de compuerta.

La conductancia a voltaje cero $G = dI/dV|_{V=0}$ en función de E_d se muestra en la Fig. 6.7. El resultado de la NCA (cuadrados azules) corresponde a muy baja temperatura $T = 1.5 \cdot 10^{-4}$. Las curvas a trazos son el resultado de respuesta lineal para diferentes temperaturas y serían como en el experimento en el sentido de que hay una temperatura mínima, no nula. A medida que el nivel localizado está más profundo debajo del nivel de Fermi, la T_K

cae exponencialmente rápido $T_K \sim e^{\frac{\pi E_d}{2\Delta}}$ y en algún momento la temperatura “experimental” T es mayor que la temperatura Kondo, deja de haber efecto Kondo y la conductancia cae. En el límite de repulsión de Coulomb infinita, a $T = 0$ la meseta nunca termina. La NCA describe bastante bien el comportamiento esperado. Se puede observar en el *recuadro interior* de la figura cómo el valor máximo en el pico de voltaje cero se mantiene cerca de $2e^2/h$ mientras que el ancho del pico, relacionada con T_K , disminuye fuertemente.

6.2. El efecto Kondo SU(4)

Vuelvo a nuestro modelo de interferencia presentado en el **Capítulo 5** y analizo el caso más simétrico que se muestra en la Fig. 6.8.

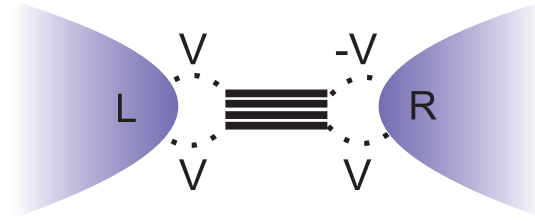


Figura 6.8: Esquema de los parámetros relevantes del modelo en el límite de simetría SU(4). Los cuatro niveles (dos dobletes) están degenerados y los acoplamientos son los mismos en módulo. La fase es π .

En este caso, los dos dobletes están degenerados y los acoplamientos son los mismos en módulo (desviaciones de esto serán considerados más adelante). En el caso en que la fase es $\phi = \pi$ el modelo tiene simetría SU(4). Haciendo $E_1 = E_2 = E_d$ y $V_1 = V_2 = V$ y tomando $\phi = \pi$ las diferentes contribuciones al Hamiltoniano de la Ec. (5.1) se convierten en

$$H_C = E_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \text{Coulomb repulsion},$$

y

$$H_{MIX} = V \sum_{k\sigma} \left(c_{kL\sigma}^\dagger d_{1\sigma} + c_{kL\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + c_{kR\sigma}^\dagger d_{1\sigma} - c_{kR\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + H.c. \right).$$

Las matrices de hibridación claramente no son proporcionales

$$\Gamma_\sigma^L = \frac{\pi V^2}{D} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma_\sigma^R = \frac{\pi V^2}{D} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Introduciendo las combinaciones lineales

$$\alpha_\sigma^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\sigma}^\dagger + d_{2\sigma}^\dagger), \quad \beta_\sigma^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\sigma}^\dagger - d_{2\sigma}^\dagger),$$

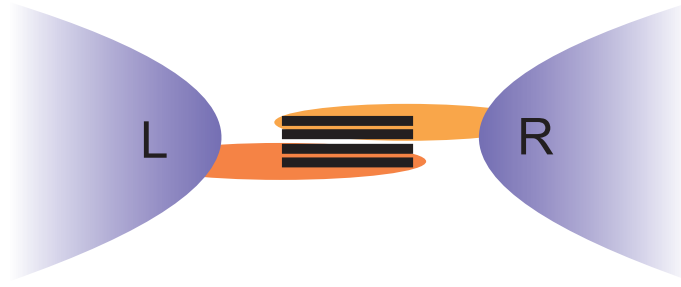


Figura 6.9: El Hamiltoniano SU(4) efectivo se puede obtener cuando los dobletes son degenerados y están conectados con los mismos coeficientes de acoplamiento en el caso de fase π . Es posible formar dos combinaciones lineales de los dobletes que se hibridan uno con el cable izquierdo y el otro con el derecho. Las propiedades termodinámicas a bajas temperaturas corresponden al efecto Kondo SU(4), pero el transporte es muy diferente de un modelo de Anderson SU(4).

el Hamiltoniano de los niveles localizados se convierte en

$$H_C = E_d \sum_{\sigma} [\alpha_{\sigma}^{\dagger} \alpha_{\sigma} + \beta_{\sigma}^{\dagger} \beta_{\sigma}] + \text{Coulomb repulsion},$$

y la hibridación,

$$H_{MIX} = \sqrt{2}V \sum_{k\sigma} [c_{kL\sigma}^{\dagger} \alpha_{\sigma} + c_{kR\sigma}^{\dagger} \beta_{\sigma} + H.c.],$$

por lo tanto, $H = H_{banda} + H_{\alpha} + H_{\beta} + U_{\alpha\beta}$ donde

$$H_{\alpha} = E_d \sum_{\sigma} \alpha_{\sigma}^{\dagger} \alpha_{\sigma} + \sqrt{2}V \sum_{k\sigma} [c_{kL\sigma}^{\dagger} \alpha_{\sigma} + H.c.] + \text{Coulomb repulsion},$$

$$H_{\beta} = E_d \sum_{\sigma} \beta_{\sigma}^{\dagger} \beta_{\sigma} + \sqrt{2}V \sum_{k\sigma} [c_{kR\sigma}^{\dagger} \beta_{\sigma} + H.c.] + \text{Coulomb repulsion},$$

y $U_{\alpha\beta}$ es la repulsión de Coulomb mutua. Este Hamiltoniano tiene simetría SU(4) para $U_{\alpha}, U_{\beta}, U_{\alpha\beta} \rightarrow \infty$. El estado α_{σ} se hibrida con el cable izquierdo y el otro estado β_{σ} con el cable derecho. En equilibrio, las propiedades termodinámicas de este Hamiltoniano son equivalentes a las del modelo de Anderson SU(4) pero **las propiedades de transporte son completamente diferentes**. Como se ilustra en la Fig. 6.9 la fase π hace que en el modelo efectivo los cables izquierdo y derecho esten desconectados!

Para entender esta diferencia, es apropiado comparar con el Hamiltoniano del modelo de Anderson SU(4) [Hewson, 1997]

$$H = H_{band} + E_d \sum_{m=1}^4 d_m^{\dagger} d_m + \frac{U}{2} \sum_{m,m' \neq m}^4 d_m^{\dagger} d_m d_{m'}^{\dagger} d_{m'} + V \sum_{km\nu} [c_{km\nu}^{\dagger} d_m + H.c.],$$

que describe las posibles proyecciones del momento magnético con un índice $m = 1, \dots, 4$ y donde las bandas del metal también se identifican con

el índice m . Es muy importante que en el Anderson SU(4) aplicado para el transporte, hay 4 bandas $c_{km}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} [c_{km \in L}^\dagger + c_{km \in R}^\dagger]$ acopladas a cada una de las proyecciones como se ilustra en la Fig. 6.10(a). En contraste, en el límite SU(4) de nuestro modelo dos de las “proyecciones” están acopladas al cable de la izquierda (α con espín hacia arriba y hacia abajo) y las otras dos al cable derecho (ver Fig. 6.10(b)).

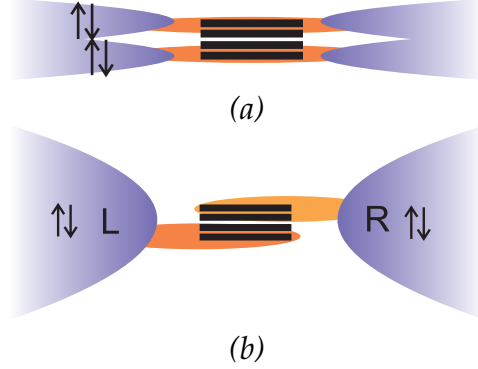


Figura 6.10: (a) Esquema del modelo de Anderson SU(4) aplicado al transporte. Cada uno de los dobletes se acopla con su propia banda de conducción. (b) La conexión de los cables en el límite de simetría SU(4) obtenida como un caso especial de nuestro modelo de interferencia con $\phi = \pi$, dobletes degenerados y acoplamientos iguales.

En el modelo de Anderson SU(4) el ancho del nivel resonante por canal es $\Delta \equiv \Delta^m = (\Delta_L^m + \Delta_R^m) = \frac{\pi V^2}{D}$, donde la densidad de estados para el cable es $\rho_0 = \frac{1}{2D}$. La hibridación es $\Gamma^m = 2\Delta^m$, por lo tanto, $\Gamma_L^m = \Gamma_R^m = \Delta^m = \frac{\pi V^2}{D}$. En nuestro modelo, después de la transformación en los estados α (+) y β (−) se puede observar que el Hamiltoniano efectivo resultante tiene simetría SU(4) con un acoplamiento $V' = \sqrt{2}V$. La hibridación por canal es de $\Gamma_{\pm\sigma} = 2\frac{\pi V'^2}{D}$, por lo tanto, el ancho nivel resonante da $\Delta_{\pm\sigma} = \Gamma_{\pm\sigma}/2 = \frac{\pi V'^2}{D}$. No hay acoplamiento a izquierda y derecha, pero el acoplamiento es $\sqrt{2}$ veces más fuerte.

En este límite SU(4), la densidad de estados calculada en equilibrio se muestra en la Fig. 6.11. La energía de los dobletes es de $E_d = -4$ y la unidad de energía se elige como $\Gamma_{\pm\sigma} = 2\Delta = 1$.

El primer punto a notar es que en comparación con el límite SU(2) el pico Kondo es más ancho (ver la Fig. 6.3). El aumento de la degeneración conduce a un incremento del efecto Kondo. Las correlaciones son mucho más fuertes porque hay muchos procesos posibles de “inversión de espín” (invertir el espín y cambiar el índice orbital). Esto se puede comprobar inmediatamente en la expresión analítica de la temperatura de Kondo para el modelo de Anderson SU(N) dada por la Ec. (6.1) donde la degeneración N va en el exponente. Esta función se representa en la Fig. 6.12. El cambio en la escala de energía T_K es de varios órdenes de magnitud.

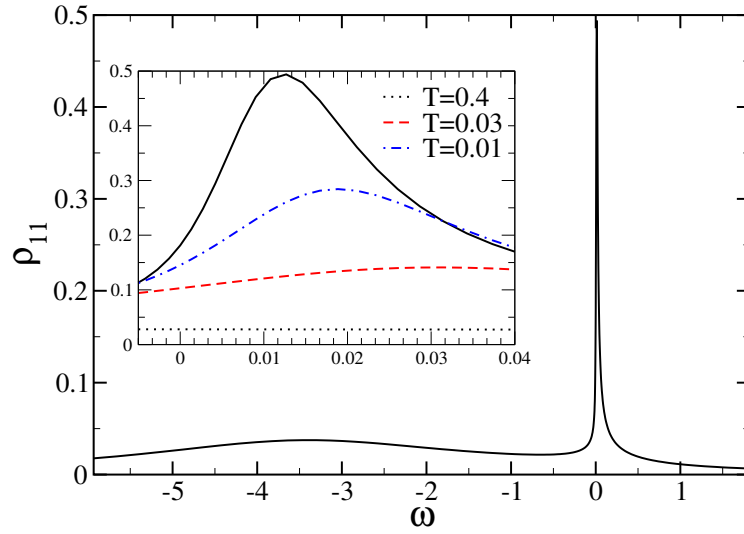


Figura 6.11: Densidad de estados del doblete localizado etiquetado con 1. El resultado corresponde al límite de simetría SU(4). La energía de los 4 estados degenerados es $E_d = -4$, la mitad del ancho de banda es $D = 10$ y $\Delta = 0.5$. La temperatura es $T = 5 \cdot 10^{-3}$. Se puede observar que existe una resonancia Kondo ancha cerca del nivel de Fermi, además del pico de transferencia de carga en $\omega = E_d$. La evolución del pico Kondo con la temperatura se muestra en el recuadro interior.

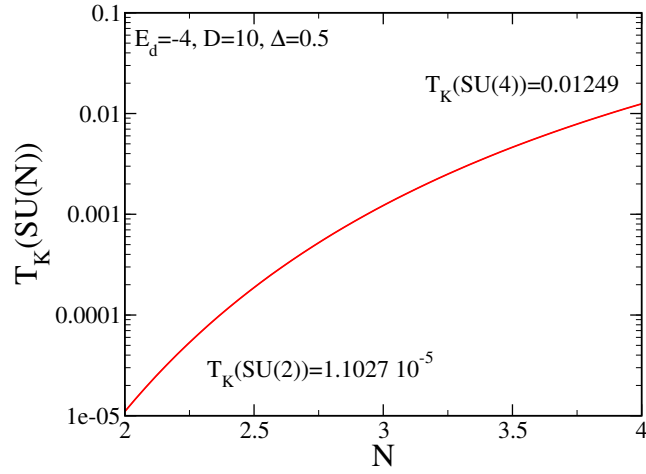


Figura 6.12: Temperatura de Kondo T_K para un modelo de Anderson SU(N) obtenida con Bethe Ansatz en función de N (véase la Ec. (6.1)) para $E_d = -4$, $\Delta = 0.5$ y $D = 10$.

En los casos particulares de interés,

$$T_K(SU(2)) = D \left(\frac{2\Delta}{D} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{-\pi|E_d|}{2\Delta}},$$

$$T_K(SU(4)) = D \left(\frac{4\Delta}{D} \right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-\pi|E_d|}{4\Delta}}.$$

Para $\Delta = 0.5$ y $E_d = -4$, $T_K(SU(4)) = 0.0125$. Como en el caso SU(2), el

ancho de la resonancia Kondo en la Fig. 6.11 está también relacionado con T_K a temperaturas muy bajas. La temperatura Kondo tomada de la mitad del ancho a mitad del máximo es $T_K^{WHM} = 0.013$, que se encuentra en muy buen acuerdo con la expresión analítica obtenida con Bethe Ansatz. Con respecto a la temperatura de Kondo el resultado del cálculo corresponde a $T = 0.38 T_K$. La aproximación *non crossing* es una aproximación $1/N$ y la precisión aumenta con la degeneración.

Una segunda característica a notar es que el máximo de la densidad de estados en el límite SU(4) se desplaza de $\omega = 0$. Dado que la ocupación media total $\langle n_d \rangle = \sum_{i\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle$ es de aproximadamente 1 en el régimen de Kondo, la ocupación de cada estado $|i\sigma\rangle$ es ~ 0.25 . El máximo se desplaza con respecto al caso SU(2). Un análisis de la regla suma de Friedel a temperatura cero indica que la densidad de estados para cada proyección en el nivel de Fermi es $\rho_m(0) = \frac{1}{\pi\Delta_m} \sin^2(\pi\langle n_m \rangle) \approx \frac{1}{2\pi\Delta_m}$, que es la mitad del valor esperado en el límite SU(2). La comparación entre los casos SU(2) y SU(4) para $E_d = -4$, $\Delta = 0.5$ y $D = 10$ para la misma temperatura respecto a T_K , $T = 0.5 T_K$, se muestra en la Fig. 6.13.

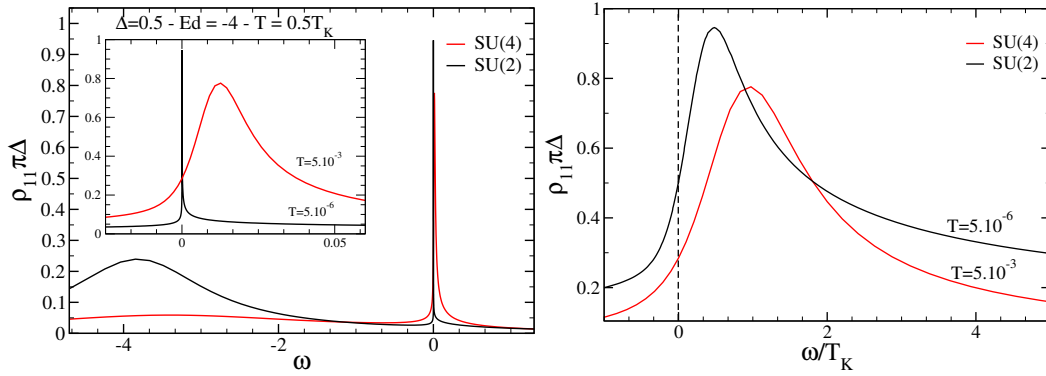


Figura 6.13: Densidades de estados para el caso SU(2) (línea continua negra) y SU(4) (línea continua roja) a la misma temperatura con respecto a la temperatura de Kondo $T = 0.5 T_K$ en función de (a) ω y (b) ω/T_K . Parámetros: $E_d = -4$, $\Delta = 0.5$ y $D = 10$.

6.3. SU(4) con un campo de ruptura de simetría

El límite SU(4) de alta simetría se puede romper de varias maneras: acoplamientos ligeramente diferentes a los niveles 1 y 2, una fase distinta de π o una diferencia de energía δ entre los dobletes. Como se discute más adelante en la tesis los dos primeros casos producen (de una manera no trivial) un desdoblamiento efectivo de energía $\tilde{\delta}$. En consecuencia, es conveniente analizar cuál es el efecto de un campo que rompe la simetría.

Los parámetros relevantes del modelo efectivo se ilustran en la Fig. 6.14. La parte localizada del Hamiltoniano se convierte en

$$H_C = E_1 \sum_{\sigma} d_{1\sigma}^{\dagger} d_{1\sigma} + (E_1 + \delta) \sum_{\sigma} d_{2\sigma}^{\dagger} d_{2\sigma} + \text{Coulomb repulsion},$$

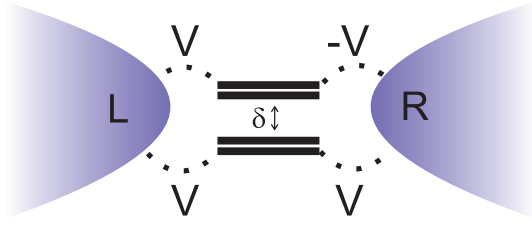


Figura 6.14: Esquema de la modificación del modelo en el SU(4) con la introducción de un campo de ruptura de la simetría δ .

donde E_2 se escribe como $E_1 + \delta$ y la hibridación se puede escribir como

$$H_{MIX} = V \sum_{k\sigma} \left[(c_{kL\sigma}^\dagger + c_{kR\sigma}^\dagger) d_{1\sigma} + H.c. \right] + V \sum_{k\sigma} \left[(c_{kL\sigma}^\dagger - c_{kR\sigma}^\dagger) d_{2\sigma} + H.c. \right],$$

dado que $\phi = \pi$. Mediante la introducción de las combinaciones lineales

$$c_{1k\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{kL\sigma}^\dagger + c_{kR\sigma}^\dagger) \quad c_{2k\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{kL\sigma}^\dagger - c_{kR\sigma}^\dagger),$$

el Hamiltoniano se convierte en

$$\begin{aligned} H = & H_{banda} + E_1 \sum_{\sigma} d_{1\sigma}^\dagger d_{1\sigma} + (E_1 + \delta) \sum_{\sigma} d_{2\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + \text{Coulomb repulsion} \\ & + \sqrt{2}V \sum_{k\sigma} \left[c_{1k\sigma}^\dagger d_{1\sigma} + c_{2k\sigma}^\dagger d_{2\sigma} + H.c. \right], \end{aligned}$$

que es un modelo de Anderson SU(4) efectivo con un “campo” que rompe la simetría produciendo un desdoblamiento δ como se muestra en la Fig. 6.15. (i) En el límite de $\delta = 0$, la simetría SU(4) se restaura. (ii) En el límite de $\delta \rightarrow \infty$, el doblete excitado está muy lejos en energía y $\langle n_2 \rangle \approx 0$. Sólo hay un doblete relevante que tiene simetría SU(2).

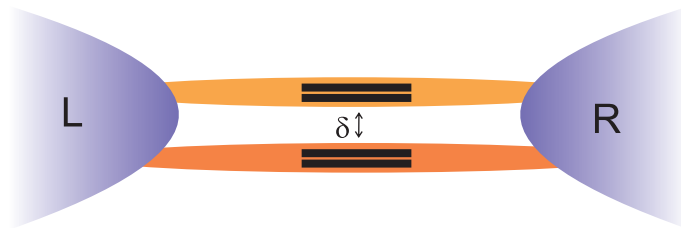


Figura 6.15: Los electrones de conducción a la izquierda y a la derecha se pueden combinar para mostrar explícitamente cómo el modelo se reduce a un modelo de Anderson SU(4) con campo de ruptura de la simetría δ .

El efecto de este campo “efectivo” se puede observar en las densidades de estados mostradas en la Fig. 6.16 para diferentes valores de δ . El primer comentario importante es que las densidades de estados que corresponden

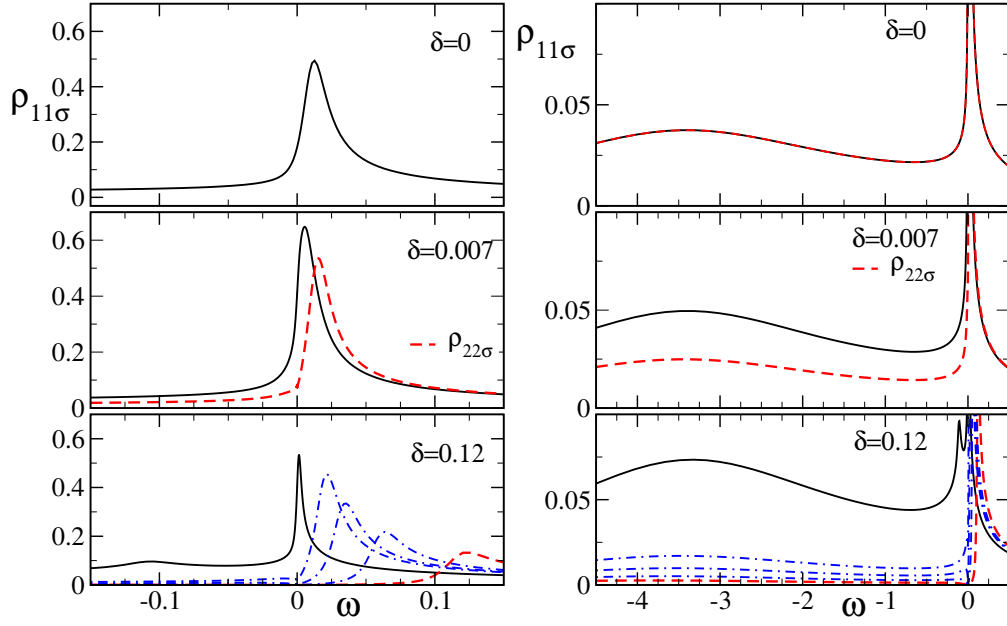


Figura 6.16: Evolución de la densidad de estados de los niveles localizados con el desdoblamiento δ . Un zoom a las energías cercanas al nivel de Fermi se muestra en el panel de la izquierda, mientras que un rango extendido se muestra en el panel derecho para incluir al pico de transferencia de carga. La línea de color negro corresponde al doblete marcado con 1 cuya energía está fijada en $E_1 = -4$. Para $\delta = 0$ (paneles superiores), ambos niveles están degenerados y $\rho_1 = \rho_2$. Cuando la degeneración se rompe esto ya no es cierto. En los paneles medio e inferior, la densidad de estados del segundo doblete también se muestra con línea roja discontinua. Su energía es $E_2 = E_1 + \delta$. Para pequeño δ (paneles intermedios) ρ_1 se desplaza hacia la izquierda y ρ_2 hacia la derecha. La resonancia Kondo en ρ_1 es más estrecha. El pico de transferencia de carga es también mucho menor en ρ_2 , lo cual es razonable puesto que está menos poblado. En los paneles inferiores se muestra el desplazamiento del pico en ρ_2 con $\delta = 0.015, 0.03$ y 0.06 con líneas azules discontinuas. Estos picos se encuentran en $\omega = \delta$. En ρ_1 , la resonancia Kondo es aún más estrecha y también hay un pico satélite pequeños en $\omega = -\delta$. El pico de transferencia de carga no está presente en ρ_2 para grandes valores de δ . Todas las curvas corresponden a $T = 1 \cdot 10^{-3}$, $\Delta = 0.5$ y $D = 10$.

a cada uno de los dobletes ρ_1 y ρ_2 son en general diferentes. Ellas sólo coinciden cuando hay simetría SU(4).

El efecto del aumento de δ en el SU(4) es como romper el efecto Kondo SU(2) con un campo magnético. En este sentido, el efecto de la ruptura de simetría no se observa inmediatamente en las densidades de estados, sino por el contrario, para muy pequeños δ , pareciera que el efecto Kondo SU(4) estuviera presente aunque para $\delta \neq 0$ la simetría ya es SU(2). Tan pronto como el desdoblamiento es mayor que la temperatura de Kondo SU(4), $\delta \sim T_K(\text{SU}(4)) = 1.2 \cdot 10^{-2}$, el efecto se hace evidente. Para pequeño δ , la resonancia Kondo se desdobra en dos picos, y ρ_1 y ρ_2 pasar a diferenciarse. Para el doblete fundamental, la resonancia Kondo se desplaza a la izquierda y para el doblete excitado, a la derecha. Esto es consistente con la transición a un efecto Kondo de un sólo nivel con simetría SU(2).

Otra consecuencia interesante del proceso de romper la simetría es la aparición de **picos satélite**. Aparecen picos satélite en $\omega = -\delta$ en ρ_1 y en $\omega = +\delta$ en ρ_2 . Del mismo modo que la resonancia Kondo, estos picos se producen por los posibles procesos que involucran electrones de conducción en el nivel de Fermi en eventos de *co-tunneling*. Cuando el desdoblamiento es muy grande, la única contribución del doblete excitado proviene de estos procesos virtuales. Esta imagen se puede complementar con la evolución del pico de transferencia de carga que se muestra en el panel derecho de la Fig. 6.16. Los picos satélites permanecen incluso para δ grandes como se muestra en la Fig. 6.17. El sistema para $\delta \rightarrow \infty$ está en el límite SU(2) de un nivel.

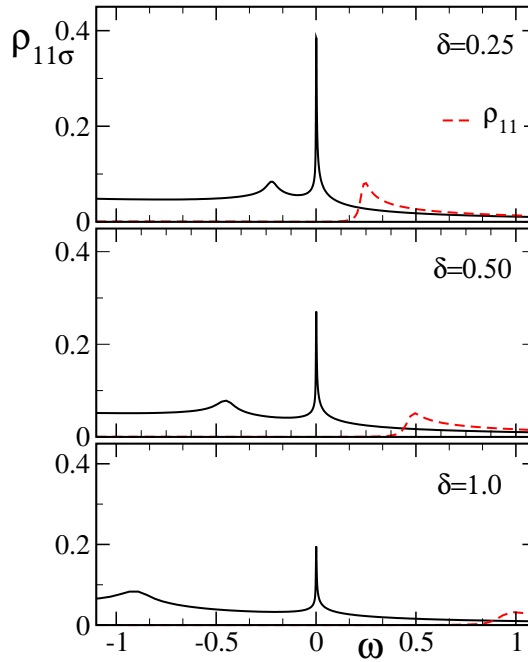


Figura 6.17: Como complemento de la Fig. 6.16, las densidades de estados de los niveles localizados (línea continua negra para ρ_1 y línea discontinua roja para ρ_2) se muestran para δ grandes.

En la transición del efecto Kondo SU (4) a un nivel SU(2), la escala relevante del problema, la temperatura de Kondo, varía órdenes de magnitud. La evolución de T_K a medida que la simetría se rompe puede obtenerse a partir del ancho mitad del pico de Kondo cerca del nivel de Fermi. $T_K(\delta)$ se muestra en la Fig. 6.18. Utilizando un enfoque variacional (ver Sec. 6.4) es posible encontrar una expresión que interpola la temperatura Kondo entre $\delta = 0 \rightarrow \infty$. Esta expresión analítica se muestra también en la figura con línea de trazos. El valor se ha multiplicado por un factor de 0.606. Del comportamiento de T_K es claro que el régimen cambia una vez que el desdoblamiento $\delta \sim T_K(SU(4))$.

Este estudio de las densidades de estados de equilibrio en el límite de simetría SU(4) y en presencia de un campo de ruptura de simetría es la base

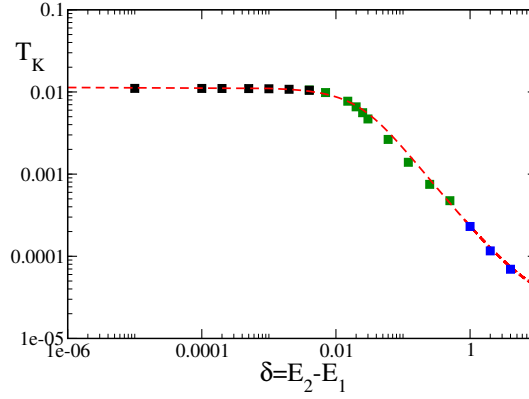


Figura 6.18: Evolución de la temperatura de Kondo con el desdoblamiento $\delta = E_2 - E_1$. La línea roja punteada corresponde a la expresión analítica de la Ec. 6.8 obtenida con un enfoque variacional. Los puntos se han extraído de la mitad del ancho a media altura del pico de Kondo cerca de $\omega = 0$ en ρ_1 calculada aproximadamente a $T = 0.1T_K$. Los parámetros son: $\Delta = 0.5$, $E_1 = -4$ y $D = 10$.

para entender las propiedades de transporte presentadas en el **Capítulo 7** donde la interrelación entre el efecto Kondo y la interferencia cuántica conduce a comportamientos muy interesantes.

6.4. Derivación variacional de la temperatura de Kondo

El estado fundamental en el régimen de Kondo es una función de onda complicada formada en parte por los electrones de conducción y en parte por los electrones localizados en un estado singlete [Yafet and Varma, 1985]. Teniendo en cuenta esto, proponemos una función de onda

$$|\Psi\rangle = A|FS\rangle + \sum_{ik\sigma} B_{ik\sigma} d_{i\sigma}^\dagger c_{ki\sigma} |FS\rangle, \quad (6.3)$$

donde $|FS\rangle = |FS_1\rangle \otimes |FS_2\rangle$ es el producto tensorial de los mares de Fermi, $|FS_i\rangle = \prod_{k < k_F, k \in i} c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow}^\dagger |0\rangle$. La aplicación del Hamiltoniano da

$$\begin{aligned} H|\Psi\rangle &= AE_0|FS\rangle + \sum_{ik\sigma} B_{ik\sigma} (E_0 + E_i - \epsilon_k) d_{i\sigma}^\dagger c_{ki\sigma} |FS\rangle \\ &+ A \sum_{ik\sigma} V_{ik\sigma}^* d_{i\sigma}^\dagger c_{ki\sigma} |FS\rangle + \sum_{ik\sigma} B_{ik\sigma} V_{ik\sigma} |FS\rangle, \end{aligned} \quad (6.4)$$

donde E_0 es la energía total de los electrones de conducción. La condición $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, conduce a las ecuaciones

$$\begin{aligned} AE_0 + \sum_{ik\sigma} B_{ik\sigma} V_{ik\sigma} &= EA \\ \sum_{ik\sigma} B_{ik\sigma} (E_0 + E_i - \epsilon_k) + A \sum_{ik\sigma} V_{ik\sigma}^* &= E \sum_{ik\sigma} B_{ik\sigma}. \end{aligned}$$

De la segunda,

$$B_{ik\sigma} = -\frac{AV_{ik\sigma}^*}{(E_0 + E_i - \epsilon_k - E)},$$

e insertando esto luego en la primera ecuación

$$(E_0 - E) - \sum_{ik\sigma} \frac{V_{ik\sigma}^* V_{ik\sigma}}{(E_0 + E_i - \epsilon_k - E)} = 0. \quad (6.5)$$

Para acoplamientos independientes del momento y del espín, y considerando una densidad de estados constante para los electrones de conducción ρ_0^i , la Ec. (6.5) resulta

$$\begin{aligned} (E_0 - E) - \sum_{i\sigma} \rho_0^i |V_i|^2 \int_{-D}^0 \frac{d\epsilon}{(E_0 + E_i - \epsilon - E)} &= 0 \\ \Rightarrow (E_0 - E) - \sum_{i\sigma} \rho_0^i |V_i|^2 \ln \left| \frac{E_0 + E_i + D - E}{E_0 + E_i - E} \right| &= 0, \end{aligned}$$

donde D es la mitad del ancho de banda. Introduciendo la temperatura de Kondo $T_K = (E_0 + E_1) - E$ como la diferencia de energía entre el nuevo estado fundamental y la energía del nivel localizado aislado más el mar Fermi,

$$T_K - E_1 - 2\rho_0^1 |V_1|^2 \ln \left| \frac{T_K + D}{T_K} \right| - 2\rho_0^2 |V_2|^2 \ln \left| \frac{T_K + D + \delta}{T_K + \delta} \right| = 0, \quad (6.6)$$

donde $E_2 = E_1 + \delta$. Dado que $T_K \ll D$, $|E_1|$, e introduciendo el ancho del nivel resonante $\Delta_i = \pi \rho_0^i |V_i|^2$,

$$\boxed{\frac{\pi E_1}{2\Delta_1} = \ln \left| \frac{T_K}{D} \right| + \left(\frac{\Delta_2}{\Delta_1} \right) \ln \left| \frac{T_K + \delta}{D + \delta} \right|}. \quad (6.7)$$

Esta temperatura de Kondo da los valores límite adecuados, para $\delta = 0$,

$$\begin{aligned} \frac{\pi E_1}{2\Delta_1} &= \left(1 + \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \right) \ln \left| \frac{T_K}{D} \right|, \\ \Rightarrow T_K(\delta = 0) &= D \exp \left(\frac{\pi E_1}{2(\Delta_1 + \Delta_2)} \right), \end{aligned}$$

y δ muy grande ,

$$\frac{\pi E_1}{2\Delta_1} = \ln \left| \frac{T_K}{D} \right| \Rightarrow T_K(\delta \rightarrow \infty) = D \exp \left(\frac{\pi E_1}{2\Delta_1} \right).$$

Si los acoplamientos son los mismos,

$$\begin{aligned} \left| \frac{T_K}{D} \right| \left| \frac{T_K + \delta}{D + \delta} \right| &= \exp \left(\frac{\pi E_1}{2(\Delta_1)} \right) \\ \Rightarrow T_K^2 + T_K \delta &= D(D + \delta) \exp \left(\frac{\pi E_1}{2\Delta_1} \right) \\ \Rightarrow T_K &= -\frac{\delta}{2} + \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + D(D + \delta) \exp \left(\frac{\pi E_1}{2\Delta_1} \right)} \end{aligned} \quad (6.8)$$

La interrelación entre interferencia cuántica y efecto Kondo

- 7.1 Interferencia destructiva total en el límite de simetría $SU(4)$.
- 7.2 Picos a voltaje finito.
- 7.3 Dependencia con la temperatura.
- 7.4 Observaciones para concluir.

En el **Capítulo 4** se discutió el transporte a través de un sistema de tres puntos cuánticos en una configuración particular que conduce a una corriente polarizada en espín. Mostré que con el fin de describir las propiedades de transporte era posible utilizar un modelo efectivo para la física de baja energía cerca de la degeneración entre los estados fundamentales con uno y dos electrones. Por otro lado, a partir de un análisis de la corriente a través de anillos orgánicos finitos es posible observar que los fenómenos de interferencia tienen lugar cuando muchos niveles que tienen la misma ocupación están degenerados orbitalmente. En el caso de moléculas de anillos estos estados pueden ser caracterizados con el vector de onda total $\pm K$ compatible con la simetría del anillo y están degenerados debido a la simetría de reflexión (en ausencia de un flujo externo). Con esta idea en mente presenté nuestro modelo para describir fenómenos de interferencia en el **Capítulo 5**. El modelo de Aligia es una generalización del modelo de Anderson, que considera un singlete con N electrones y dos dobletes con $N \pm 1$ electrones. Tres de los acoplamientos de los dobletes a los cables se pueden hacer reales con transformaciones de calibre adecuadas pero hay uno que sigue siendo complejo. La fase ϕ de este acoplamiento representa la diferencia de fase entre los “caminos de muchos cuerpos”. Esto significa que la conexión entre la fuente y el sumidero puede tener una diferencia de fase en función del doblete que es ocupado. El modelo es muy general y describe la física de baja energía de los sistemas interactuantes que presentan fenómenos de interferencia. Nuestro cálculo es una mejora sustancial respecto a los resultados anteriores sobre la conductancia a través de sistemas con efectos de interferencia, ya que introduce el régimen de Kondo no considerado en otros estudios, así como los efectos de temperatura y voltaje finito fuera de equilibrio.

En el **Capítulo 6** se consideraron varios límites del modelo. En particular, el límite de simetría SU(4) que se puede encontrar cuando ambos dobletes están degenerados, para acoplamientos iguales en módulo y fijando la fase $\phi = \pi$. En equilibrio, desde el punto de vista termodinámico, el modelo efectivo es como un modelo de Anderson SU(4) con una hibridación renormalizada. Sin embargo, desde el punto de vista de las propiedades de transporte, éstas son completamente diferentes a lo que prediciría este modelo. En este capítulo las propiedades de transporte de no equilibrio de nuestro modelo de interferencia se abordan en el régimen del efecto Kondo SU(4). Como se muestra en lo siguiente, la fase $\phi = \pi$ conduce a **interferencia destructiva total**.

7.1. Interferencia destructiva total en el límite SU(4)

¿Cuál es el significado de la fase π en este contexto? Como en un interferómetro estándar, los electrones se desplazan desde la fuente al sumidero a través de uno de los brazos del interferómetro. Si la fase acumulada por los electrones en cada uno de los caminos difiere por un múltiplo impar de π , hay un mínimo en la probabilidad de encontrar electrones en el punto final. Si ambos brazos son los mismos, es decir, si la amplitud de los electrones que toman un camino u otro es la misma, esta probabilidad es estrictamente cero y la interferencia se dice que es completamente destructiva. Análogamente, el electrón que entra en el conductor central puede ocupar cualquier doblete 1 o 2 y puede hacerlo con espín hacia arriba o hacia abajo. Si los acoplamientos a los dobletes son los mismos y estos están degenerados, resultan equivalentes y tienen la misma “amplitud” en el mismo sentido que antes. El hecho de que los estados de muchos cuerpos tengan una simetría diferente da lugar a la fase ϕ incluida en uno de los acoplamientos. Para $\phi = \pi$, la probabilidad para que los electrones pasen de la fuente al sumidero es cero y la interferencia es perfectamente destructiva.

Como se discutió en el **Capítulo 6**, el efecto de la fase se puede entender haciendo una transformación en el Hamiltoniano. El Hamiltoniano efectivo del modelo de Aligia es

$$\begin{aligned}
 H = & E_s |0\rangle \langle 0| + \sum_{i\sigma} E_i |i\sigma\rangle \langle i\sigma| + \sum_{\nu k\sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k\sigma}^\dagger c_{\nu k\sigma} \\
 & + \sum_{i\nu k\sigma} (V_\nu^i |i\sigma\rangle \langle 0| c_{\nu k\sigma} + \text{H.c.}),
 \end{aligned}$$

donde el singlete $|0\rangle$ y los dos dobletes $|i\sigma\rangle$ ($i = 1, 2$, $\sigma = \uparrow$ o \downarrow) denotan los estados localizados, $c_{\nu k\sigma}^\dagger$ crea estados de conducción a la izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$), y V_ν^i describe los elementos de salto entre los cables y los dos dobletes. En el caso que nos ocupa, ambos dobletes están relacionados por una operación de simetría en la ausencia de un flujo magnético aplicado (por ejemplo simetría de reflexión), por lo tanto $|V_\nu^1| = |V_\nu^2|$. Cuando los

dobletes están degenerados $E_2 = E_1$ y tomando $\phi = \pi$, el estado

$$|L\sigma\rangle = (|1\sigma\rangle + |2\sigma\rangle)/\sqrt{2}$$

se mezcla sólo con la izquierda y el estado

$$|R\sigma\rangle = (|1\sigma\rangle - |2\sigma\rangle)/\sqrt{2},$$

se mezcla sólo con el cable derecho y por lo tanto la corriente no puede ser transportada entre los cables (véase la Fig. 6.9 en el **Capítulo 6**). Esta es una situación de interferencia destructiva perfecta. El Hamiltoniano tiene simetría SU(4). Describe cuatro estados degenerados $\{|L\sigma\rangle, |R\sigma\rangle\}$ acoplados cada uno a una banda diferente con acoplamiento $V' = \sqrt{2}|V_\nu^i|$. Las propiedades termodinámicas a bajas temperaturas corresponden al efecto Kondo SU(4) pero las propiedades de transporte son completamente diferentes de un modelo de Anderson SU(4).

El efecto de la fase $\phi = \pi$ se puede observar en la Fig. 7.1. Esta figura es el resultado principal de este capítulo y tiene una gran cantidad de información condensada. Se muestra con puntos azules la conductancia G a voltaje cero como función de la diferencia de energía entre los dobletes, $E_2 = E_1 + \delta$. La conductancia cae abruptamente a cero a medida que $\delta \rightarrow 0$, es decir, a medida que los dobletes se vuelven degenerados y el sistema entra en el límite de simetría SU(4).

(i) El primer comentario importante es que en nuestro modelo, las matrices de hibridación de los estados $|i\sigma\rangle$ con los cables izquierdo y derecho no son proporcionales para $\phi \neq 0$, y como consecuencia los trucos para relacionar la conductancia a $V = 0$ con la densidad local de estados no pueden utilizarse y la conductancia $G = dI/dV$ tiene que ser calculada mediante la diferenciación numérica de la corriente incluso para $V \rightarrow 0$, utilizando un formalismo de no equilibrio.

Para los cálculos numéricos, la densidad de estados de los electrones de conducción en los cables ρ se supone constante y extendida entre $-D$ y D . La unidad de energía se ha tomado como $\Gamma = 2\Delta = 2\pi\rho(V')^2$. Sin pérdida de generalidad, la energía del singlete y el nivel de Fermi se ponen a cero $E_s = \epsilon_F = 0$ y $\delta = E_2 - E_1 > 0$. Nuestro modelo efectivo se enfoca sobre el régimen de Kondo, es decir, $E_s - E_1 \gg \Delta$, para el cual la conductancia es mayor.

(ii) Cambiando de base $c_{1k\sigma}^\dagger = (c_{Lc\sigma}^\dagger + c_{Rk\sigma}^\dagger)/\sqrt{2}$, $c_{2k\sigma}^\dagger = (c_{Lc\sigma}^\dagger - c_{Rk\sigma}^\dagger)/\sqrt{2}$, como en el **Capítulo 6**, se puede observar que δ actúa como un campo que rompe la simetría en un modelo de Anderson SU(4), reduciéndola a SU(2). Para $\delta \rightarrow \infty$, el doblete con la energía E_2 puede ser descartado y el modelo se reduce al habitual modelo de Anderson SU(2) de un nivel. Por lo tanto, nuestro modelo interpola entre un modelo con simetría SU(4) y un SU(2) de un nivel. En correspondencia con esta ruptura de simetría, la evolución de la ocupación con δ para ambos dobletes se muestra con triángulos (apuntando hacia arriba para el nivel 1 y hacia abajo para el nivel 2) en la Fig. 7.1. Los valores de la ocupación corresponden al eje derecho en la figura.

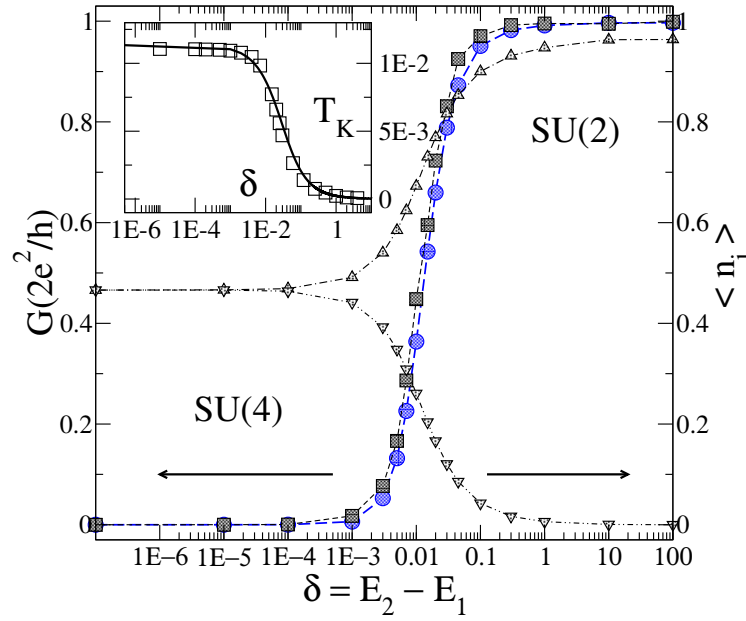


Figura 7.1: Conductancia de equilibrio a $T \ll T_K$ (escala izquierda) y ocupaciones (escala derecha) en función del desdoblamiento δ . Los cuadrados fueron obtenidos mediante la diferenciación numérica de la corriente y los círculos corresponden a la Ec. (7.2). Recuadro interior: temperatura de Kondo como función de δ . Los cuadrados (línea continua) corresponden al resultado de la NCA (analítico). Los parámetros son $\Delta = 0.5$, $D = 10$, $E_1 = -4$, $E_2 = E_1 + \delta$.

Para desdoblamiento pequeño, los dobletes son cuasi degenerados con una ocupación que es casi la misma, cerca de 0.48. Esto es consistente con el régimen de Kondo: cuando el nivel cuatro veces degenerado está muy por debajo del nivel de Fermi, la ocupación total es cerca de 1 a bajas temperaturas, lo que significa un 0.25 por espín e índice orbital.

El régimen SU(4) no se pierde inmediatamente. Por el contrario, siempre y cuando el desdoblamiento es más pequeño que la temperatura de Kondo del SU(4) T_K , los niveles son cuasi degenerados. Esto es muy similar al efecto de un campo magnético en el caso SU(2) donde se pierde la degeneración de espín y el efecto Kondo se rompe una vez que el desdoblamiento Zeeman excede T_K . Como se muestra en la figura, cuando $\delta \sim T_K$ (SU(4)) el doblete excitado comienza a despoblarse $\langle n_2 \rangle \rightarrow 0$, la ocupación del estado fundamental aumenta $\langle n_1 \rangle \rightarrow 1$ y la conductancia a baja temperatura también aumenta $G \rightarrow 2e^2/h$.

(iii) En contraste con el modelo de Anderson SU(4) donde cada proyección m está acoplada a una banda diferente, en nuestro caso el efecto de la fase π es hacer que interfieran los canales y tan pronto como el sistema se encuentra en el régimen SU(4), la conductancia cae abruptamente a cero. La interferencia es totalmente destructiva.

(iv) La temperatura de Kondo T_K depende exponencialmente de la degeneración N , de la energía del nivel localizado y de la hibridación. A medida que la simetría se rompe de SU(4) a SU(2), T_K varía órdenes de magnitud.

En esta transición suave, hay otra escala relevante: δ . La dependencia $T_K(\delta)$ se discutió en el **Capítulo 6** y también se muestra en el *recuadro interior* en la Fig. 7.1. Los cuadrados blancos corresponden a la mitad del ancho a la mitad del máximo de la resonancia Kondo cerca del nivel de Fermi. La línea continua negra es la expresión analítica ¹

$$T_K^V = \{(D + \delta)D \exp[\pi E_1/(2\Delta)] + \delta^2/4\}^{1/2} - \delta/2, \quad (7.1)$$

que describe con gran precisión el comportamiento de la temperatura de Kondo, $T_K = fT_K^V$, donde f es un factor del orden de 1 (0.606 para los parámetros de la Fig. 7.1). La expresión analítica interpola entre ambos límites del SU(N), $T_K^V = D \exp[\pi E_1/(N\Delta)]$ ($N = 4$ para $\delta = 0$ y $N = 2$ para $\delta \rightarrow +\infty$). Aproximadamente, $T_K(\delta)$ se mantiene constante en el valor del SU(4) $T_K(0)$ (0.0138 para los parámetros de la figura), siempre que $\delta < T_K(0)$, y luego disminuye exponencialmente (en casi dos órdenes de magnitud para $\delta = 1$) antes de plancharse en el valor de un SU(2) para un nivel. Como es evidente en la Fig. 7.1, $T_K(0)$ es también la escala de energía característica de la variación de la conductancia con δ , para $T = V = 0$. Para δ un orden de magnitud inferior a $T_K(0)$, G_0 es muy pequeña, mientras que para $\delta \gg T_K(0)$, G_0 se aproxima al valor ideal para un doblete con SU(2), $2e^2/h$.

Dada la gran variación de la temperatura de Kondo, el resultado mostrado en la figura corresponde a $T = 0.05T_K(\delta)$. Esto significa que para cada campo δ , el sistema está a la misma temperatura con respecto a la temperatura de Kondo.

(v) En el régimen de Kondo SU(N), una vez que se apantalla el magnetismo, el estado fundamental es un líquido de Fermi. A $T = V = 0$, la conductancia $G(T, V)$ se puede calcular a partir del corrimiento de la fase de dispersión. Este corrimiento se pueden relacionar con los valores medios $n_{i\sigma} = \langle |i\sigma\rangle \langle i\sigma| \rangle$ generalizando la regla de suma Friedel al modelo SU(4) con un campo que rompe la simetría. Para una densidad de estados de los cables constante

$$G_0 = G(0, 0) = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} \sin^2 [\pi(n_{1\sigma} - n_{2\sigma})]. \quad (7.2)$$

En la Fig. 7.1 se muestra esta regla de suma generalizada en función de δ con círculos azules. El resultado obtenido a partir de la diferenciación numérica de la corriente calculada a temperaturas muy bajas se encuentra en muy buen acuerdo con esta propiedad del líquido de Fermi. Esto da confianza en el procedimiento numérico y en la consistencia de los resultados de la NCA para la corriente y la ocupación $n_i = 2n_{i\sigma}$.

7.2. Picos a voltaje finito

Uno de los efectos del campo de ruptura de simetría δ es la presencia de picos secundarios en la conductancia diferencial a voltajes que satisfacen $eV_b = \pm\delta$. Se observó en el análisis del **Capítulo 6** que tan pronto como

¹Ec. (6.8) en el **Capítulo 6** obtenida con un enfoque variacional.

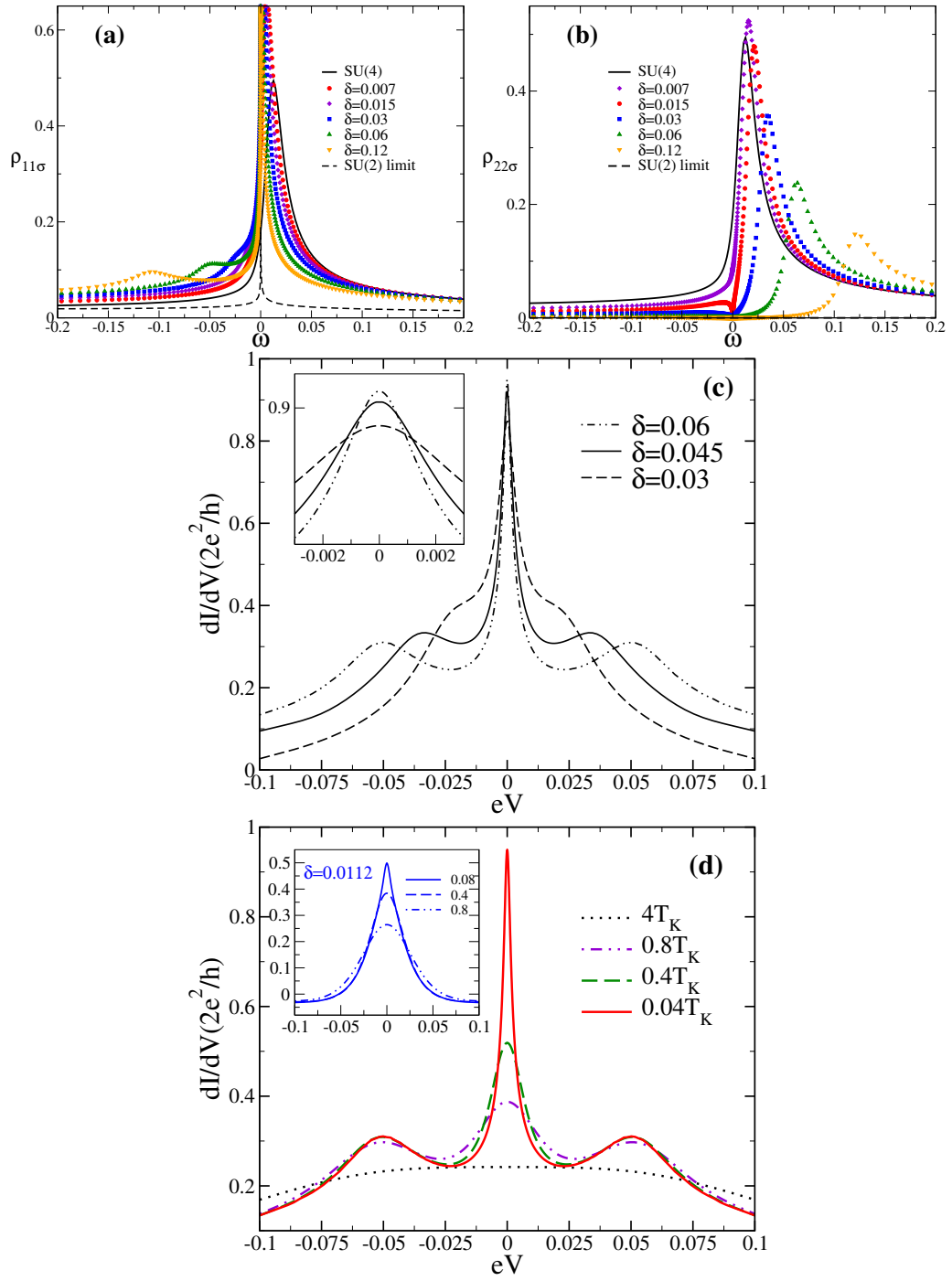


Figura 7.2: Evolución de la densidad de estados de los niveles localizados (a) ρ_1 y (b) ρ_2 a medida que la simetría se rompe con el desdoblamiento $\delta = E_2 - E_1$. A medida que δ aumenta, la resonancia Kondo en la densidad de estados del doblete de menor energía se hace más estrecha y también aparece un pico en $\omega = -\delta$. En la densidad de estados del doblete de mayor energía sólo hay un pico en $\omega = +\delta$. (c) Conductancia diferencial dI/dV como función del voltaje para diferentes valores de δ . Es posible observar la presencia de picos a tensión finita correspondientes a los picos satélite en las densidades de estados. En el recuadro interior se muestra un zoom para observar cómo la conductancia aumenta para mayor desdoblamiento. (d) dI/dV vs V_{bias} para diferentes temperaturas a $\delta = 0.06$ y $\delta = 0.0112$ en el panel interior.

$\delta \sim T_K(SU(4))$, la resonancia Kondo en la densidad de estados de los dobletes localizados $\rho_i(\omega)$ se desdobla. A medida que δ aumenta, la densidad de estados del doblete de menor energía $\rho_1(\omega)$ desarrolla un pico Kondo estrecho cerca de $\omega = \epsilon_F = 0$ y un pico satélite en $\omega = -\delta$. Por otro lado, la densidad de estados del doblete excitado $\rho_2(\omega)$ exhibe sólo un pico en $\omega = +\delta$. La evolución de la densidad de estados con δ a bajas temperaturas se muestra en la Figs. 7.2(a) y (b). Los picos de satélite son una consecuencia de las correlaciones. Hay procesos virtuales donde los electrones van de un doblete a los cables y luego hacia el otro doblete, o lo opuesto, dando lugar a estos picos satélite.

Ellos son observables en un experimento de transporte. Como se muestra en la Fig. 7.2(c), la conductancia diferencial a baja temperatura muestra picos a voltaje finito en $eV_b \sim \pm\delta$. Esta es una de las ventajas de la NCA. Es posible reproducir características del transporte inelástico que se pierden con otras técnicas o en un cálculo de respuesta lineal. En el *recuadro interior* de la Fig. 7.2(c) hay un zoom hacia el pico central para mostrar cómo se recupera la conductancia de la interferencia destructiva total a medida que δ aumenta.

Los picos de satélite, como la propia resonancia Kondo, son causados por correlaciones. En la Fig. 7.2(d) la conductancia diferencial para $\delta = 0.06$ se muestra a diferentes temperaturas. Los picos a voltaje finito tienen una dependencia con la temperatura más débil en comparación con la resonancia Kondo en $V_b = 0$, pero desaparecen a temperaturas suficientemente altas. Para este valor de δ , el efecto de la interferencia destructiva es menos importante y el valor de saturación de la conductancia de equilibrio es cerca de $G(V_b \approx 0) \sim [2e^2/h]$. Como se muestra en el *recuadro interior* de la Fig. 7.2(d), la conductancia a bajas temperaturas alcanza un menor valor $G(V_b \approx 0) = 0.5[2e^2/h]$ para $\delta = 0.011$. Como se discute en la siguiente sección, la dependencia con temperatura también es diferente cuando $\delta > T_K(SU(4))$.

7.3. Dependencia con temperatura

En esta sección se aborda el efecto de la temperatura en el transporte. La temperatura de Kondo T_K es la escala que cuantifica la importancia de las correlaciones en el régimen de Kondo. Cuando se rompe la simetría, hay otra escala relevante: el desdoblamiento δ . En función del campo de ruptura de simetría δ , la temperatura de Kondo varía órdenes de magnitud. En el límite de $\delta = 0$ o $\delta = \infty$, escalando con las correspondientes T_K , la dependencia de las propiedades de transporte con la temperatura puede ser descrita con expresiones universales que dependen de la degeneración. No hay expresiones universales para valores intermedios de δ incluso si el escalo se realiza con la correspondiente $T_K(\delta)$.

En la Fig. 7.3 se muestra la evolución de la conductancia $G = dI/dV|_0$ con la temperatura para dos valores del desdoblamiento δ . El eje de ordenadas

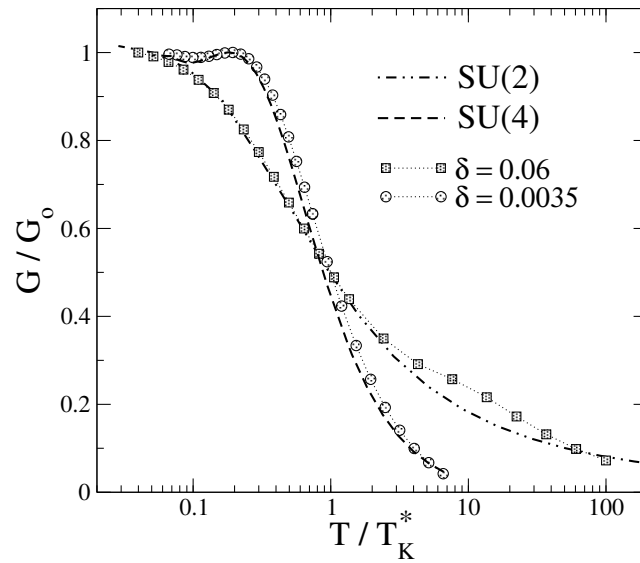


Figura 7.3: Conductancia de equilibrio como función de la temperatura para varios valores del desdoblamiento. La línea a trazos [punteada] corresponde al límite de un modelo de Anderson con un nivel y simetría SU(4) [SU(2)]. Otros parámetros como en la Fig. 7.1. Para $\delta = 0.0035$, $G(0) = 0.08$ y $T_K^* = 0.0137$, mientras que para $\delta = 0.06$, $G(0) = 0.97$ y $T_K^* = 0.0025$.

está normalizado con $G(0)$, la conductancia para $T \rightarrow 0$, y el de abscisas con T_K^* , el valor de la temperatura para la cual $G(T_K^*) = G(0)/2$. Como es de esperarse $T_K^* \sim T_K(\delta)$. Tanto $G(0)$ como T_K^* tienen una fuerte variación con δ . Los resultados correspondientes a los límites SU(4) ($\delta = 0$) y SU(2) también se muestran ($\delta \rightarrow \infty$).

La dependencia de la conductancia con la temperatura es muy diferente en cada uno de estos límites. En particular, el efecto de las correlaciones en la conductancia parece ocurrir más abruptamente en el caso SU(4). De hecho, para $\delta = 0.0035$, $G(0)$ es muy pequeña ($G(0) = 0.08[2e^2/h]$) debido a la interferencia destructiva pero T_K^* es mucho mayor. El aumento del efecto Kondo debido a la gran degeneración hace que el cambio en la conductancia sea muy rápido cuando $T \sim T_K$. Se encuentran valores cercanos a $G(0)$ en un rango más amplio de temperaturas por debajo de la temperatura de Kondo.

Por otro lado, para $\delta = 0.06$, más cerca del límite SU(2), $G(T/T_K^*)$ aumenta hasta $G(0) = 0.97[2e^2/h]$ a medida que disminuye la temperatura, pero esto ocurre más lentamente. Las correlaciones no son tan fuertes y la saturación al valor $G(0)$ se encuentra a muy bajas temperaturas $T \sim 0.1 T_K$. La protuberancia observada en la curva para $\delta = 0.06$ es debido a la contribución del doblete excitado. De hecho, en unidades de T_K^* , $\delta \sim 20T_K^*$, que corresponde con que este nivel extra se hace accesible con temperatura. Como se discutió en el **Capítulo 6**, hay picos satélite incluso para δ grande. La presencia de esta característica es una prueba de la no universalidad de las curvas.

En un experimento realista hay una cierta temperatura T a la que se realizan las mediciones. Esta temperatura puede ser inferior o superior a la temperatura de Kondo y de acuerdo con esto, los efectos de las correlaciones puede ser importantes o no, y lo mismo para la interferencia cuántica.

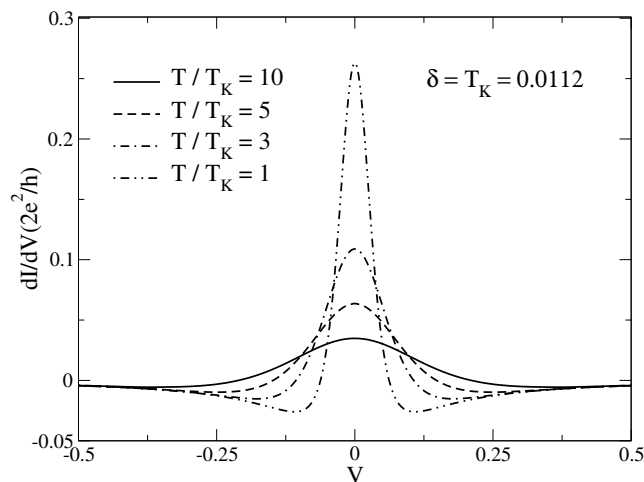


Figura 7.4: Conductancia diferencial como función del voltaje a diferentes temperaturas para $\delta = 0.0112$. Otros parámetros como en la Fig. 7.1.

En la Fig. 7.4 la conductancia diferencial dI/dV_b vs V_b se muestra para un determinado campo δ muy cerca de $T_K = 0.011$. Esta cifra es ligeramente inferior a $T_K(SU(4))$. El desdoblamiento corresponde a una región intermedia entre el $SU(4)$ y el $SU(2)$. Para altas temperaturas $T = 10 T_K$, la conductancia diferencial es sólo una Lorentziana con un máximo a voltaje cero. Esto es sólo un efecto Kondo incipiente. A medida que desciende la temperatura, en algún momento $T = T_K$, y la conductancia toma valores negativos para voltajes por encima de $\delta \sim T_K$. Esta conductancia diferencial negativa es una característica muy interesante que podría ser observada experimentalmente.

Nuestra interpretación de este resultado es la siguiente. Dado que $\delta \sim T_K$, hay solamente un efecto parcial de interferencia a pequeños voltajes y el doblete que se encuentra más bajo en energía juega un papel dominante. Sin embargo, cuando la energía suministrada por la fuente eV aumenta más allá del desdoblamiento δ , ambos dobletes contribuyen con casi el mismo peso a la corriente, pero en sentidos opuestos debido a la interferencia destructiva. Por lo tanto, la corriente empieza a disminuir a medida que el efecto del doblete excitado aumenta para mayores voltajes aplicados.

Otro efecto de la temperatura finita es la presencia de una depresión en la corriente como función del desdoblamiento del nivel. Esto se muestra en la Fig. 7.5, donde la corriente a voltaje fijo $V_b = T_K(SU(4))$ está graficada en función de δ . A una temperatura finita hay un comportamiento no monótono de la corriente debido a dos efectos que compiten. Uno podría esperar un aumento monótono de la corriente con el desdoblamiento del nivel como consecuencia del debilitamiento de la interferencia destructiva. Sin embar-

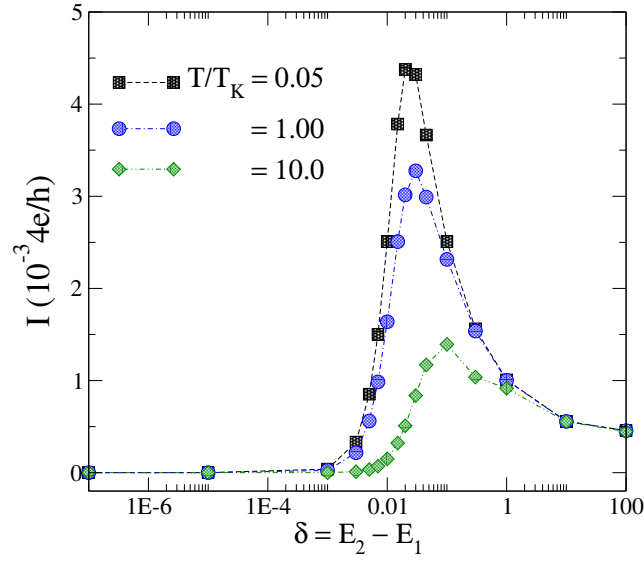


Figura 7.5: Corriente en función del desdoblamiento δ para $eV = T_K^4 = 0.016$ y diferentes temperaturas proporcionales a $T_K(\delta)$. Otros parámetros como en la Fig. 7.1.

go, la temperatura de Kondo T_K disminuye fuertemente con δ , y para una tensión aplicada fija una reducción de T_K implica una disminución en la corriente. A bajo V y $T = 0$, para un nivel con simetría $SU(N)$, $G(V) = dI/dV$ tiene un pico con un ancho del orden de $2T_K/e$. Por lo tanto la corriente a tensiones que exceden unos pocos T_K/e es aproximadamente proporcional a T_K . La depresión es más pronunciada para temperaturas más bajas.

7.4. Conclusiones

En este capítulo se han abordado las propiedades de transporte fuera de equilibrio y a temperatura finita para nuestro modelo efectivo. El modelo contiene dos dobletes, que describen la física de baja energía de sistemas nanoscópicos con interferencia cuántica. En el régimen de Kondo, cambios dramáticos en los valores de la conductancia y su dependencia con temperatura ocurren a medida que el desdoblamiento del doblete cambia con la acción de algún parámetro externo. Para la interferencia destructiva total, el modelo interpola entre el modelo de Anderson $SU(4)$ cuando el desdoblamiento de los dos dobletes es $\delta = 0$, y el modelo habitual $SU(2)$ para grandes δ . En el régimen de Kondo, mientras que la temperatura característica T_K aumenta significativamente hacia el límite de $SU(4)$, ambos, la conductancia de equilibrio (a voltaje $V = 0$) y la corriente total a tensiones finitas desaparecen debido a la interferencia destructiva. Para V finito la corriente total tiene un pico en algún δ debido a la interrelación entre la interferencia y el efecto Kondo; y para $\delta \sim T_K$, la conductancia diferencial se hace negativa debido a la interferencia destructiva parcial.

En resumen, teniendo en cuenta la interrelación entre dos efectos rele-

vantes, es decir, la interferencia cuántica y el efecto Kondo, hemos mostrado las consecuencias importantes que esta competencia puede tener sobre las propiedades de transporte a través de una gran variedad de sistemas nanoscópicos y moleculares para los cuales nuestro modelo efectivo da una descripción realista.

Transporte a través de una molécula de benceno en el régimen de Kondo

- 8.1 Conexión de los cables a la molécula de benceno.
- 8.2 La corriente.
- 8.3 Interferencia destructiva parcial.
- 8.4 Analogía con la ruptura de simetría SU(4) en el límite de fase $\phi = \pi$.
- 8.5 Dependencia de la conductancia con temperatura.
- 8.6 La fase y el desdoblamiento efectivo.
- 8.7 Conclusiones.

Nuestro modelo efectivo para describir las propiedades de transporte en sistemas nanoscópicos que muestran efectos de interferencia está inspirado en estructuras en forma de anillo, tales como moléculas orgánicas o arreglos de puntos cuánticos. En este capítulo se analiza el caso particular de la molécula de benceno.

Como se discutió en el **Capítulo 5**, el modelo de Aligia se construye partiendo de los autoestados exactos para un anillo simétrico. Se trata de una generalización efectiva del Hamiltoniano de Anderson para baja energía que contiene dos dobletes de espín con momentos opuestos y un singlete que corresponde al estado neutro. Para el benceno, el singlete representa el estado fundamental de la molécula neutra, mientras que los dobletes corresponden a tener una sola carga. El ingrediente clave de nuestro modelo resulta en que no es posible hacer todos los acoplamientos reales mediante transformaciones de calibre. Hay una fase restante que depende de la simetría de los estados y de la geometría de la conexión. Puede ser pensada como una diferencia de fase entre los posibles “caminos” para los electrones que van desde la fuente al sumidero.

El transporte a través de la molécula de benceno se estudió en el régimen de Kondo, con la molécula dopada con un electrón o un hueco. Este es un régimen interesante debido al incremento de la conductancia como

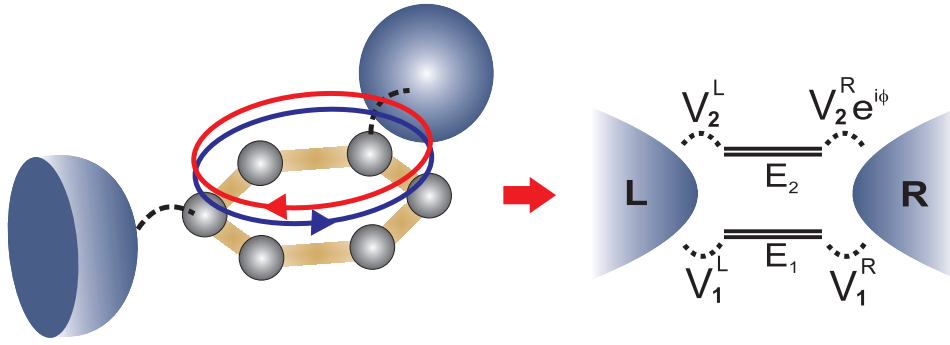


Figura 8.1: Esquema de los elementos de matriz relevantes a baja energía.

consecuencia del efecto Kondo y también debido a la interrelación entre la interferencia cuántica y las correlaciones. En el **Capítulo 6** presenté resultados que muestran cómo el modelo es adecuado para describir el efecto Kondo en el caso de un solo doblete hibridado con los electrones de conducción de los cables, donde el modelo posee simetría $SU(2)$, y también el límite de simetría $SU(4)$ donde los dobletes están degenerados, tienen iguales acoplamientos y hay una fase π . Las propiedades de transporte discutidas en el **Capítulo 7** dan cuenta de los cambios dramáticos que se producen a medida que la simetría se rompe de $SU(4)$ a $SU(2)$ con un único nivel. En particular, el efecto de la fase π con plena degeneración es producir interferencia destructiva total: corriente y conductancia cero en el límite $SU(4)$ a bajas temperaturas.

La fase depende de la geometría de la conexión y de la simetría de los estados, como se explica en el **Capítulo 5**. Se calcularon las propiedades de transporte en la molécula de benceno con los cables conectados en diferentes posiciones. Cuando los cables están conectados en la posición *para* (a 180 grados), el modelo es equivalente al modelo ordinario de la impureza de Anderson y se recuperan sus propiedades conocidas. Para otras posiciones, hay una **interferencia destructiva parcial** en los procesos de *co-tunneling* que implican los dos dobletes.

Las características observables del transporte a través de una molécula de benceno se discuten en este capítulo. La interferencia destructiva parcial es más bien un efecto débil para ser detectado pero hay características a energías finitas que aparecen en la conductancia diferencial y que podrían ser bien observadas en un experimento.

8.1. Conexión de los cables a la molécula de benceno

Nuestro modelo puede ser pensado como una descripción efectiva de un anillo de n sitios con un orbital por sitio y simetría C_{nv} (o C_n), débilmente acoplado a dos cables, reteniendo para n par, el singlete de más baja energía

con n partículas y los dos dobletes de menor energía con $n + 1$ partículas (electrones o huecos dependiendo el signo del voltaje de compuerta aplicado V_g)¹. Para el benceno, $n = 6$ y el transporte se estudia en un régimen de V_g para el que se ven favorecidos los dobletes, dando lugar al efecto Kondo.

Usando transformaciones de calibre, tres de los cuatro elementos de matriz de salto entre los dobletes y los cables se pueden hacer reales. La fase ϕ del cuarto coeficiente es en general diferente de cero y depende de la posición de los cables y de los vectores de onda de los estados involucrados. Los elementos de matriz relevantes de nuestro modelo efectivo están representados a la derecha en la Fig. 8.1. Es una ilustración del mapeo del problema de muchos cuerpos a una descripción efectiva para la física de baja energía, cerca de la degeneración entre los estados con n y $n + 1$ partículas en el sistema. Nuestro modelo efectivo contiene un singlete con vector de onda total K_0 (normalmente 0 o π) y dos dobletes con vectores de onda K_1 y K_2 , que representan los estados de energía más baja de las dos configuraciones vecinas de un anillo de n sitios con simetría C_{nv} . En el caso del benceno, se corresponden con el estado fundamental singlete, invariante bajo rotaciones ($K_0 = 0$) y dos dobletes degenerados con vector de onda total $\pm K$, que son el estado fundamental de la molécula con un electrón o un hueco más. Los estados $|\pm K\rangle$ están representados en la parte izquierda de la Fig. 8.1 con flechas azules y rojas que apuntan en sentidos opuestos.

Para un hueco adicional $K = \pi/3$, mientras que para un electrón añadido $K = 2\pi/3$. El Hamiltoniano efectivo es

$$H = E_s |s\rangle \langle s| + \sum_{i\sigma} E_i |i\sigma\rangle \langle i\sigma| + \sum_{\nu k\sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k\sigma}^\dagger c_{\nu k\sigma} \\ + \sum_{i\nu k\sigma} (V_i^\nu |i\sigma\rangle \langle s| c_{\nu k\sigma} + \text{H.c.}),$$

donde el singlete $|s\rangle$ y los dos dobletes $|i\sigma\rangle$ ($i = 1, 2, \sigma = \uparrow$ o \downarrow) denotan los estados localizados, $c_{\nu k\sigma}^\dagger$ crea estados de conducción a la izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$), y V_i^ν describe los elementos de matriz de salto entre los cables y los dos dobletes, asumidos independientes de k .

Como se discutió en el **Capítulo 5**, este elemento de salto se puede obtener a partir de cálculos realistas de la molécula de benceno. Esta dado por

$$V_i^\nu = t_\nu \langle i\sigma | c_{j_\nu\sigma}^\dagger | S \rangle, \quad (8.1)$$

donde $c_{j\sigma}^\dagger$ crea un electrón (o agujero) con espín σ en el orbital π en el sitio j (entre 1 y n) de la molécula, j_ν denota el sitio conectado al cable ν y t_ν es el salto de entre este sitio y el cable ν .

Eligiendo adecuadamente las fases en la transformación de calibre $|i\sigma\rangle \rightarrow e^{i\phi_i} |i\sigma\rangle$, ambos V_i^L se pueden hacer reales y positivos, y por simetría reflexión $V_1^L = V_2^L$.

Usando la simetría de rotación es fácil ver que

$$V_i^R = (t_R/t_L) V_i^L \exp[-i(j_R - j_L)(K_i - K_0)], \quad (8.2)$$

¹Para n impar, la carga de los dobletes y el singlete se intercambia

donde K_i es el vector de onda de $|i\sigma\rangle$. La fase de V_1^R puede ser absorbida por una transformación de calibre en $c_{Rk\sigma}$, haciéndolo real y positivo. El elemento de matriz restante es $V_2^R = V_1^R e^{-i\phi}$, donde $\phi = (j_R - j_L)(K_2 - K_1)$. Este resultado es general para una geometría de anillo.

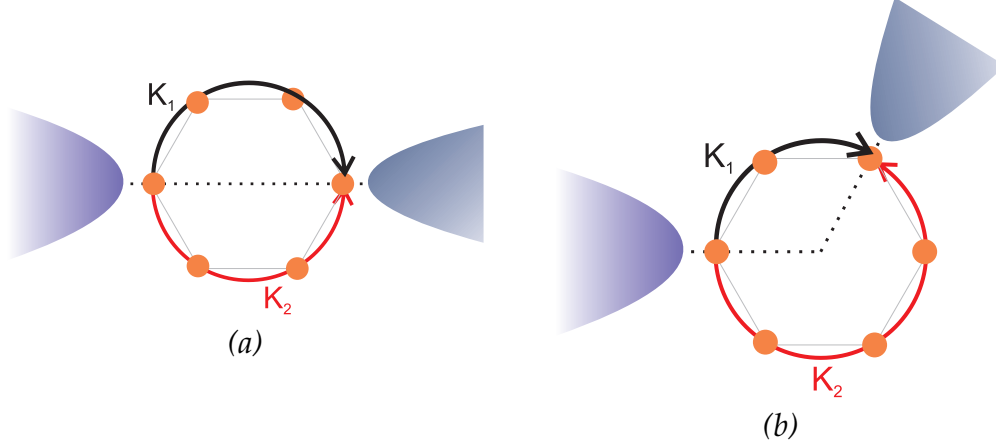


Figura 8.2: Conexión de la molécula de benceno en posición (a) para y (b) meta.

Para el benceno $K_2 - K_1 \equiv \pm 2\pi/3$. Como se muestra en la Fig. 8.2, si los cables están conectados en la posición *para* ($j_R - j_L = 3$), $\phi \equiv 0$, mientras que en la posición *orto* ($j_R - j_L = 1$) o *meta* ($j_R - j_L = 2$), $\phi \equiv \pm 2\pi/3$. Donde el signo de ϕ no afecta nuestros resultados.

Para simplificar supondremos $|t_R/t_L| = 1$ en los cálculos que se presentan. Entonces, los saltos de los cables a los estados relevantes de la molécula de benceno son $V_1^L = V_2^L = V_1^R = V$, $V_2^R = V e^{-i\phi}$, con $\phi = 0$ para la posición *para* y $\phi = \pm 2\pi/3$ para las otras dos posibilidades de conexión de los cables.

Para $\phi = 0$, el estado

$$|B\sigma\rangle = (|1\sigma\rangle - |2\sigma\rangle)/\sqrt{2}$$

se desacopla de los cables y las propiedades de transporte del sistema son las mismas que las de un solo nivel

$$|A\sigma\rangle = (|1\sigma\rangle + |2\sigma\rangle)/\sqrt{2}$$

conectado a los cables, con elementos de salto $\sqrt{2}V$, que es el límite bien conocido SU(2).

Como se analiza a continuación, para $\phi = 2\pi/3$, los resultados son similares a lo que pasaría si hubiera un desdoblamiento de energía $\tilde{\delta}$ entre los dobletes. Éstos pueden ser analizados en analogía con el efecto de un desdoblamiento verdadero δ en el límite S(4)U (presentados en los **Capítulos 6 y 7**).

8.2. La corriente

El cálculo de la corriente a través de la molécula de benceno, descrito por nuestro modelo efectivo, debe realizarse con la expresión general que se deriva en el **Capítulo 3** y que se particulariza en el **Capítulo 6**. Esta expresión es apropiada para cuantificar la corriente a través de una región con interacciones entre electrones a temperatura y voltaje finito. Está dada principalmente en términos de las funciones de Green de no equilibrio de los niveles localizados

$$I = \pm \frac{ie}{h} \int d\omega \text{Tr}[(\Gamma^L f_L(\omega) - \Gamma^R f_R(\omega)) \mathbf{G}_d^>(\omega) + (\Gamma^L(1 - f_L(\omega)) - \Gamma^R(1 - f_R(\omega))) \mathbf{G}_d^<(\omega)],$$

donde el signo $+(-)$ corresponde al caso en el que los dobletes tienen un electrón (hueco) más que el singlete, $f_\nu(\omega) = [\exp[(\omega - \mu_\nu)/kT] + 1]^{-1}$ donde μ_ν es el potencial electro-químico del cable ν y Γ^ν , $\mathbf{G}_d^<$ y $\mathbf{G}_d^>$ son matrices de 2×2 : la matriz de la hibridación, las funciones de Green menores y mayores. En particular, teniendo la densidad de estados no perturbada de los electrones de conducción por espín $\rho = 1/(2D)$, donde $2D$ es el ancho de banda, y un acoplamiento simétrico a los cables, las matrices de hibridación resultan

$$\Gamma^L = \frac{\pi V^2}{D} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^R = \frac{\pi V^2}{D} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 1 \end{pmatrix}.$$

Donde es claro que, excepto para $\phi = 0$, Γ^L no es proporcional a Γ^R . Como consecuencia, los trucos empleados para relacionar la conductancia a $V_b = 0$ con la densidad de estados no pueden ser utilizados. La conductancia $G = dI/dV_b$ tiene que ser obtenida mediante la diferenciación numérica de la corriente, incluso para $V_b \rightarrow 0$.

Las trazas que aparecen en la ecuación de la corriente tienen la forma

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\Gamma^R \mathbf{G}_d^<) &= \frac{\pi V^2}{D} [G_{11}^< + G_{22}^< + \cos(\phi)(G_{21}^< + G_{12}^<) \\ &\quad + i \sin(\phi)(G_{21}^< - G_{12}^<)], \end{aligned}$$

y de manera similar para $\text{Tr}(\Gamma^L \mathbf{G}_d^<)$ reemplazando ϕ por 0. A partir de la definición de las funciones de Green $G_{ij}^<(t) = -G_{ji}^<(-t)$ y después de una transformada de Fourier $G_{ij}^<(\omega) = -G_{ji}^<(\omega)$. Entonces, $G_{ii}^<(\omega)$ y $G_{21}^<(\omega) + G_{12}^<(\omega)$ son imaginarias puras, mientras que $G_{21}^<(\omega) - G_{12}^<(\omega)$ es real.

Para los cálculos numéricos, la unidad de energía se elige como $\Gamma = \Gamma_{ii}^L + \Gamma_{ii}^R = 4\pi\rho V^2 = 1$, $i = 1, 2$. También Γ corresponde a dos veces el ancho del nivel resonante $\Delta = 0.5$. El presente estudio se centra en el régimen de tensiones de compuerta tal que $E_s - E_i \gg \Delta$, para el cual las correlaciones juegan un papel más importante, tiene lugar el efecto Kondo y la conductancia es mayor. El nivel de Fermi de los cables sin tensión aplicada se pone a cero y también la energía del singlete, $\epsilon_F = E_s = 0$. Se considera que el voltaje V_b cae de forma simétrica, por lo tanto, $\mu_L = eV_b/2$ y $\mu_R = -eV_b/2$.

8.3. Interferencia destructiva parcial

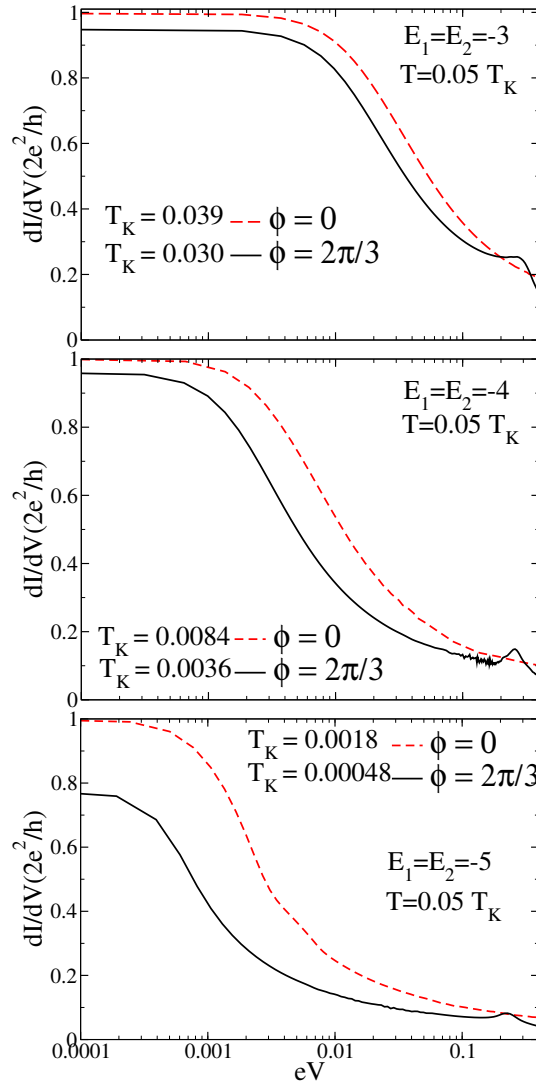


Figura 8.3: Conductancia diferencial de una molécula de benceno a baja temperatura en función del voltaje para varios valores de la energía de los dobletes con los cables conectados en posición para (línea discontinua roja) y orto o meta (línea negra continua).

Los principales resultados de las propiedades de transporte a través de una molécula de benceno se muestran en la Fig. 8.3. La conductancia diferencial $G = dI/dV_b$ en función del voltaje V_b , se muestra para las dos conexiones no equivalentes de los cables: los cables conectados a 180 grados (en la posición *para*), correspondiente a $\phi = 0$, y para los cables a 60 ó 120 grados, para las cuales $\phi = \pm 2\pi/3$ (éstas son las posiciones *orto* y *meta*). En la figura, la conductancia se muestra sólo para voltajes positivos en una escala logarítmica. Los tres paneles diferentes corresponden a diferentes posiciones de los dobletes $E_1 = E_2 = E_d$ con respecto al nivel de Fermi.

En todos los paneles, las curvas rojas discontinuas corresponden a la posición *para*, es decir, $\phi = 0$. En este límite, hay una combinación lineal de los

dobletes que se desacopla de los cables y el problema es equivalente al de transporte a través de un solo nivel con degeneración de espín. Este límite se estudió en el **Capítulo 6**, G muestra un solo pico centrado cerca de tensión cero, cuyo ancho es del orden de $2T_K/e$, donde T_K es la temperatura de Kondo. En el régimen de Kondo ésta es la única escala relevante. El valor de T_K se puede obtener de forma experimental por diferentes medios. En el **Capítulo 6** y el **Capítulo 7** se mostró que un medio del ancho a mitad del máximo de la resonancia Kondo en la densidad de estados a bajas temperaturas es una buena estimación de la temperatura de Kondo. En las propiedades de transporte, es posible determinar T_K de la mitad del ancho del pico a voltaje cero en la conductancia diferencial $G(V_b)$ para $T = 0$. También puede ser definida como la temperatura a la que $G(T)$ para $V_b = 0$ cae a la mitad del valor máximo $G(T = 0)$. Los valores de T_K que resultan de estas definiciones son todas del mismo orden. Esto es natural dado el comportamiento universal esperado para el modelo de Anderson (de un nivel individual) en el régimen de Kondo, en la que sobrevive sólo una escala de energía.

Como se muestra en la Fig. 8.3, el pico de $\phi = 0$ (curva roja discontinua) se estrecha a medida que la energía E_d es más negativa. La temperatura de Kondo varía exponencialmente con E_d , dando como consecuencia que el ancho de pico central observado en la figura también disminuya exponencialmente. En aras de claridad en las comparaciones, los cálculos en la Fig. 8.3 corresponden a $T = 0.05 T_K$, con T_K determinada a partir de la mitad de la ancho a media altura de la densidad de estados.

Cuando la molécula se conecta a los cables a 60 o 120 grados, se producen tres cambios principalmente en $G(V_b)$ en comparación con el caso $\phi = 0$: *i*) el máximo de $G(0)$ es menor, *ii*) el pico central es más estrecho y escala de una manera diferente con E_d y *iii*) dos nuevos picos aparecen a V_b finito.

i) El hecho de que la conductancia se reduce con respecto a $\phi = 0$ es debido al efecto de la **interferencia destructiva parcial** entre la corriente transmitida por los dos dobletes. En la posición *para* ($\phi = 0$) todos los acoplamientos a los conductores tienen el mismo signo, $G(0)$ es igual al cuanto de conductancia $2e^2/h$ para acoplamiento simétrico a los cables. En el caso contrario (hipotético para el benceno) de $\phi = \pi$, existe una interferencia destructiva perfecta y G se anula. El transporte a través de la molécula de benceno conectada en las posiciones *orto* o *meta*, corresponde a una situación intermedia ($\phi = \pm 2\pi/3$) y, por tanto, un valor intermedio de $G(0)$ es esperado.

ii) Las funciones de Green no diagonales que son no nulas para $\phi = 2\pi/3$ mezclan los dobletes. El efecto de esta mezcla es la apertura de un desdoblamiento efectivo $\tilde{\delta}$. Es como tener dos dobletes no degenerados. El estrechamiento del pico de la conductancia es una consecuencia de la reducción de la temperatura de Kondo debido a este desdoblamiento efectivo. Como se verá más adelante, el desdoblamiento efectivo tiene una dependencia $1/|E_d|$ (para $E_d \gg \Delta$). Esta es la razón por la que el pico es más estrecho para $E_d = -5$ en la Fig. 8.3. La T_K se reduce fuertemente respecto a $\phi = 0$ para

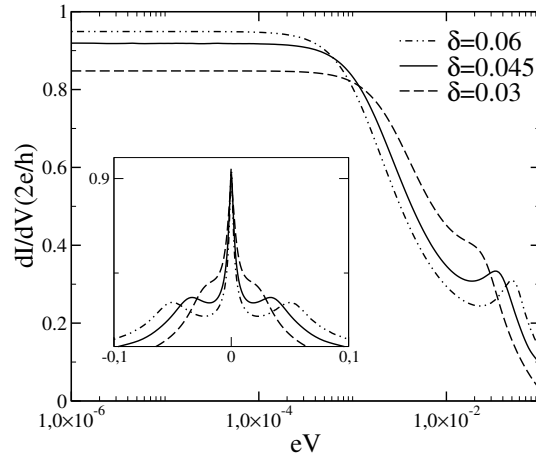


Figura 8.4: Conductancia diferencial para $\phi = \pi$ y diferentes valores del desdoblamiento del nivel localizado.

el mismo E_d . Además, $\tilde{\delta}$ también modifica el escaleo de la temperatura de Kondo con la energía. Es muy interesante notar que a medida que el desdoblamiento es más pequeño, el valor de la conductancia en $V_b = 0$ es más pequeño y el efecto de la interferencia destructiva parcial se incrementa.

iii) Para un acoplamiento asimétrico a los cables, que suele ser el caso en el transporte a través de moléculas en dispositivos construidos por electromigración (o en configuraciones STM), $G(0)$ disminuye fuertemente y **no es posible distinguir entre los cables conectados a la molécula de benceno en diferentes posiciones a partir del valor máximo de G** . Aunque existe una clara dependencia con la energía del nivel localizado a través del desdoblamiento efectivo, la conductancia disminuye ligeramente. La característica con la que sería más probable distinguir experimentalmente entre las diferentes posiciones de los cables es **la presencia de los picos satélite en $G(V_b)$** . Estos parecen depender débilmente de la energía E_d , en contraste con el ancho del pico central. Estos picos representan posibles procesos de transporte a energía finita y son una consecuencia de la apertura de una separación efectiva en la energía entre los dobletes.

Tal como se muestra a continuación, todos estos resultados pueden entenderse a la luz de nuestro estudio anterior del efecto Kondo SU(4) con un campo δ que rompe la simetría.

8.4. Analogía con la ruptura de simetría SU(4) en el límite de fase $\phi = \pi$

El efecto de la fase $\phi = \pm 2\pi/3$ en las propiedades de transporte puede ser entendido en comparación con el caso de interferencia destructiva total de $\phi = \pi$. Este límite no es posible en el benceno pero conduce a una simetría SU(4) efectiva cuando los dobletes están degenerados y los acoplamientos a

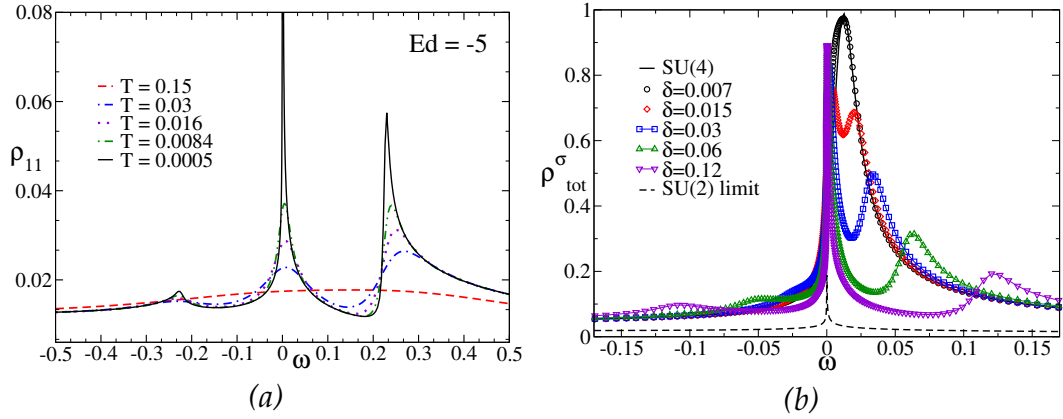


Figura 8.5: (a) Densidad espectral de equilibrio para los dobletes del benceno como función de la frecuencia, en las posiciones meta y orto a diferentes temperaturas. (b) Densidad espectral total en equilibrio como función de la frecuencia para el modelo efectivo con $\phi = \pi$, $T = 0.05 T_K$ y diferentes valores del desdoblamiento del nivel.

izquierda y derecha son iguales. En el último capítulo se consideró el efecto de un campo δ que rompe la simetría separando a los dobletes $E_2 = E_1 + \delta$. La conductancia diferencial para $\phi = \pi$ y para tres valores diferentes de δ se muestra en la Fig. 8.4. La escala de voltaje es logarítmica para apreciar mejor la similitud. Claramente, $G(V_b)$ es cualitativamente similar al resultado correspondiente para el benceno con cables conectados en las posiciones meta u orto.

La conductancia, que se anula en el límite SU(4) para $\delta = 0$, es restaurada por un δ finito y dos picos en $eV_b = \pm\delta$ aparecen. El efecto del desdoblamiento consiste por lo tanto en: *i*) un aumento de la conductancia que fue suprimida debido a la interferencia destructiva (G aumenta con δ tan pronto como $\delta > T_K(SU(4))$), *ii*) un estrechamiento del pico de conductancia debido a la reducción de la temperatura de Kondo. T_K interpola entre el límite de SU(4) para $\delta = 0$ y el límite SU(2) de un nivel para $\delta \rightarrow \infty$. Ésta última es órdenes de magnitud menor. *iii*) Hay procesos inelásticos de energía finita que son posibles debido al desdoblamiento de los dobletes. Esto conduce a picos en la conductancia diferencial en $eV_b = \pm\delta$.

Esta similitud sugiere interpretar los resultados para el benceno a partir de los de $\phi = \pi$ y $\delta = 0$ considerando la diferencia entre el acoplamiento V_2^L para $\phi = \pm 2\pi/3$ y $\phi = \pi$ como una perturbación. No hay acoplamiento directo entre los dobletes y por lo tanto la corrección tiene que ser al menos de segundo orden (ir a los cables desde el doblete 1 y volver al doblete 2, etc.). Esta perturbación, a segundo orden, introduce entre otros efectos, una mezcla efectiva entre los niveles proporcional a $V^2/|E_d|$, lo que conduce a un desdoblamiento de los dobletes. De hecho, la posición de los picos satélite en la Fig. 8.3 (que varía entre 0.3 para $E_d = -3$ a 0.22 para $E_d = -5$) es más o menos consistente con una dependencia $1/|E_d|$.

Siguiendo el mismo razonamiento, la comparación de las densidades de

estados ayuda a poner a prueba aún más esta interpretación de los resultados. En la Fig. 8.5 la comparación entre $\phi = 2\pi/3$ y $\phi = \pi$ se muestra para diferentes valores de δ . La densidad de estados de ambos dobletes para el benceno conectado a los cables en las posiciones *meta* y *orto* está representada en la Fig. 8.5(a) para diferentes temperaturas. Cuando T disminuye por debajo de T_K , no sólo un pico se desarrolla cerca de la energía de Fermi, sino también dos picos satélite (el más prominente para frecuencias positivas) están claramente presentes. En la Fig. 8.5(b) la densidad total de estados (sumando ambos niveles) se muestra para $\phi = \pi$ a temperaturas muy bajas. En este caso, el pico cerca de la energía de Fermi corresponde al doblete de más baja energía y el pico cerca de δ corresponde al de más alta energía. En contraste, cada pico en la Fig. 8.5(a) proviene de alguna combinación lineal de los dos dobletes. A pesar de esta diferencia, la similitud de las densidades de estados sugiere un origen físico común del desdoblamiento de los picos en la densidad espectral, que a su vez da lugar a los picos secundarios en $G(V_b)$ (aunque las densidades de estados se modifican con el voltaje aplicado y los picos se desvanecen).

En los **Capítulos 6 y 7** el efecto de un campo de ruptura de simetría $\delta = E_2 - E_1$ en el límite SU(4) mostró que la temperatura de Kondo se reduce hasta el límite SU(2) cuando $\delta \rightarrow +\infty$. El efecto de δ en T_K es pequeño si $\delta < T_K(SU(4))$, mientras que para mayor δ , T_K disminuye fuertemente. Por lo tanto, el hecho de que la escala de energía efectiva en las posiciones *orto* y *meta* es menor que en la posición *para* (comparar los anchos de los picos centrales en la Fig. 8.3) puede ser interpretado como un efecto del desdoblamiento efectivo del nivel causado por la fase de ϕ diferente de π . En otras palabras, parece que la posición de los picos secundarios en $G(V_b)$ (o las densidades de estado) y la protuberancia en $G(T)$ indican un $\tilde{\delta}$, que disminuye la escala de energía característica T_K .

8.5. Dependencia de la conductancia con la temperatura

La importancia de las correlaciones en el régimen de Kondo se puede perder en los experimentos debido al límite dado por la temperatura más baja accesible. La dependencia exponencial de la temperatura de Kondo con los parámetros físicos hace que sea muy difícil estudiar algunos regímenes o “permanecer” dentro de los límites en donde un efecto dado está presente. Esta es una motivación adicional para estudiar la dependencia de las propiedades de transporte discutidas aquí con temperatura. En la Fig. 8.6 la evolución de la conductancia con la temperatura $G(T)$ para $V_b = 0$ se muestra para tres valores de E_d , en el caso en que los cables están conectados en las posiciones *orto* o *meta*, es decir, con $\phi = \pm 2\pi/3$. Como se ha explicado, la conductancia $G(T)$ se obtiene diferenciando la corriente.

La escala relevante en el régimen de Kondo es la temperatura de Kondo T_K . A pesar del hecho de que es muy diferente para cada E_d , el escaleo T/T_K

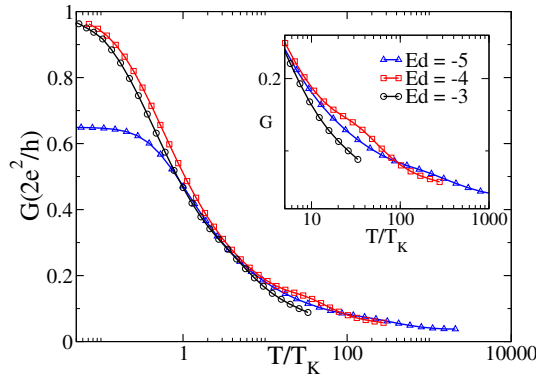


Figura 8.6: Conductancia como función de la temperatura para los cables conectados en las posiciones orto o meta para varios valores de energía de los dobletes.

permite mostrar todas las curvas juntas. La temperatura de Kondo se obtiene a partir del ancho mitad a la mitad del máximo en la densidad de estados de equilibrio $\rho_{i\sigma}(\omega)$: T_K es $3 \cdot 10^{-2}$, $3.6 \cdot 10^{-3}$ y $4.8 \cdot 10^{-4}$ para $E_d = -3$, -4 y -5 , respectivamente. Debido a una limitación de la técnica numérica, la temperatura más baja es $0.1 T_K$.

Primero, una vez que se escala con la temperatura de Kondo, todas las curvas tienen casi la misma dependencia funcional. Están cerca de la curva universal que se espera en el régimen de Kondo SU(2) para un nivel aunque aquí hay una segunda escala δ presente. En segundo lugar, el máximo de la conductancia a bajas temperaturas es muy similar para $E_d = -3$ y $E_d = -4$ y próximo al valor ideal $2e^2/h$, pero disminuye para $E_d = -5$. De acuerdo a nuestra interpretación, esto es una consecuencia de la reducción del desdoblamiento efectivo $\tilde{\delta}$ con $|E_d|$ que aumenta la interferencia destructiva. En tercer lugar, de manera similar al efecto del voltaje, a medida que aumenta la temperatura, los procesos que requieren de una energía finita se vuelven activos y contribuyen al transporte. En este caso, los picos satélite en la densidad de estados a bajas temperaturas, que estaban desde $\omega = 0.3$ para $E_d = -3$ a 0.22 para $E_d = -5$, dan lugar a una estructura en $G(T)$ en T/T_K cerca de 10, 70 y 400 para $E_d = -3$, -4 y -5 , respectivamente. Mientras que para $E_d = -3$ esta estructura está oculta en el pico principal, una especie de protuberancia es evidente para los otros valores de E_d en las posiciones correspondientes, como se muestra en el *recuadro interior* de la Fig. 8.6.

8.6. La fase y el desdoblamiento efectivo

En esta sección presento un simple cálculo para apoyar nuestro argumento sobre cómo la fase $\phi \neq \pi$ se relaciona con una separación efectiva entre los dobletes.

Teniendo en cuenta sólo la contribución orbital, la hibridación es explí-

citamente

$$\begin{aligned} H_{MIX} &= \sum_{i\nu k} (V_i^\nu |i\rangle \langle s|_{c\nu k\sigma} + H.c.) \\ &= (V_1^L |1\rangle \langle L| + V_1^R |1\rangle \langle R| + V_2^L |2\rangle \langle L| + V_2^R |2\rangle \langle R| + H.c.), \end{aligned}$$

donde $V_1^L = V_2^L = V_1^R = V$, $V_2^R = V e^{-i\phi}$. Si se toma en cuenta este acoplamiento perturbativamente a segundo orden en V , aparece una corrección al Hamiltoniano dada por los procesos de pasar de $|i\rangle$ a la banda (izquierda o derecha) y luego de vuelta a $|i\rangle$ o $|j \neq i\rangle$. A este orden,

$$\begin{aligned} H_1 &= - \left(\frac{(V_1^L)^2}{E_d} + \frac{(V_1^R)^2}{E_d} \right) |1\rangle \langle 1| - \left(\frac{(V_2^L)^2}{E_d} - \frac{V_2^R V_2^{R*}}{E_d} \right) |2\rangle \langle 2| \\ &\quad - \left(\frac{V_1^L V_2^L}{E_d} + \frac{V_1^R V_2^{R*}}{E_d} \right) |1\rangle \langle 2| - \left(\frac{V_1^L V_2^L}{E_d} + \frac{V_1^R V_2^R}{E_d} \right) |2\rangle \langle 1| \\ \Rightarrow H_1 &= - \frac{2V^2}{E_d} |1\rangle \langle 1| - \frac{2V^2}{E_d} |2\rangle \langle 2| - \frac{V^2(1 + e^{i\phi})}{E_d} |1\rangle \langle 2| - \frac{V^2(1 + e^{-i\phi})}{E_d} |2\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

La parte no diagonal del Hamiltoniano

$$- \frac{V^2}{E_d} [(1 + e^{i\phi}) |1\rangle \langle 2| + (1 + e^{-i\phi}) |2\rangle \langle 1|],$$

puede diagonalizarse observando que $(1 + e^{i\phi}) = 2 \cos(\phi/2) e^{i\phi/2}$, por lo tanto

$$- \frac{V^2 2 \cos(\phi/2)}{E_d} [e^{i\phi/2} |1\rangle \langle 2| + e^{-i\phi/2} |2\rangle \langle 1|],$$

donde los valores propios son $\lambda = \pm \frac{V^2 2 \cos(\phi/2)}{E_d}$, con vectores propios

$$\begin{aligned} |g\rangle &= [|1\rangle + e^{-i\phi/2} |2\rangle] / \sqrt{2}, \\ |e\rangle &= [|1\rangle - e^{-i\phi/2} |2\rangle] / \sqrt{2}. \end{aligned}$$

El desdoblamiento originado por la fase es por lo tanto

$$\delta_{SW} = \frac{4V^2 \cos(\phi/2)}{E_d}. \quad (8.3)$$

En el caso de $\phi = 0, \pm 2\pi/3, \pi$, el desdoblamiento es $\delta_{SW} = 4, 2, 0 \left[\frac{D\Delta}{\pi E_d} \right]$. Esto daría la dependencia $\sim 1/|E_d|$.

En la nueva base se puede encontrar el nuevo acoplamiento efectivo a la izquierda y a la derecha. La parte de la hibridación que surge de la aplicación del Hamiltoniano a estos autoestados es

$$\begin{aligned} H|g\rangle &\rightarrow V [(|L\rangle + |R\rangle) + e^{-i\phi/2}(|L\rangle + e^{i\phi}|R\rangle)] / \sqrt{2}, \\ H|e\rangle &\rightarrow V [(|L\rangle + |R\rangle) - e^{-i\phi/2}(|L\rangle + e^{i\phi}|R\rangle)] / \sqrt{2}, \end{aligned}$$

por lo tanto, los anchos de nivel resonantes correspondientes a estos niveles son

$$\begin{aligned}\Delta_{gL} &= \pi\rho_0 V^2 |1 + e^{-i\phi/2}|^2/2, \\ \Delta_{gR} &= \pi\rho_0 V^2 |1 + e^{i\phi/2}|^2/2, \\ \Delta_{eL} &= \pi\rho_0 V^2 |1 - e^{-i\phi/2}|^2/2, \\ \Delta_{eR} &= \pi\rho_0 V^2 |1 - e^{i\phi/2}|^2/2,\end{aligned}$$

por ende

$$\Delta_g = 4\pi\rho_0 V^2 \cos^2(\phi/4), \quad \Delta_e = 4\pi\rho_0 V^2 \sin^2(\phi/4),$$

son el efecto total del acoplamiento a izquierda y derecha. Éstos pueden ser pensados como resultantes de acoplamientos efectivos diferentes para cada nivel: $V_g = 2V \cos(\phi/4)$ y $V_e = 2V \sin(\phi/4)$. En el caso de $\phi = 0, \pm 2\pi/3, \pi$, los acoplamientos efectivos son $\Delta_g = 2, 3/4, 1/2 [\Delta]$ y $\Delta_e = 0, 1/4, 1/2 [\Delta]$. El significado de esto es muy razonable. Para $\phi = 0$, el autoestado excitado $|e\rangle = [|1\rangle - |2\rangle]/\sqrt{2}$ está desacoplado de los cables y el transporte se produce a través de un solo nivel efectivo $[|1\rangle + |2\rangle]/\sqrt{2}$. Para $\phi = \pi$, el desdoblamiento es cero y los autoestados $|g/e\rangle = [|1\rangle \mp i|2\rangle]/\sqrt{2}$ están igualmente acoplados. En el caso de $\phi = \pm 2\pi/3$ algo intermedio sucede. Hay una separación finita y los autoestados $|g/e\rangle = [|1\rangle \pm e^{-i\pi/3}|2\rangle]/\sqrt{2}$ no están acoplados por igual: $\Delta_g = 3/4 [\Delta]$ y $\Delta_e = 1/4 [\Delta]$.

El desdoblamiento se puede derivar de manera diferente teniendo en cuenta la teoría de escala de Haldane [Haldane, 1978a]. De acuerdo con el resultado de Haldane el hecho de que el acoplamiento de los niveles no sea el mismo produce una renormalización diferente y, por tanto, una separación efectiva

$$\delta_{\text{Hald}} = \frac{1}{\pi}(\Delta_g - \Delta_e) \ln \left(\frac{D}{E_d} \right),$$

por ende

$$\delta_{\text{Hald}} = 4\rho_0 V^2 \cos(\phi/2) \ln \left(\frac{D}{E_d} \right), \quad (8.4)$$

o $\delta_{\text{Hald}} = 2 \cos(\phi/2) \left[\frac{\Delta}{\pi} \ln \left(\frac{D}{E_d} \right) \right]$. Para $\phi = 0, \pm 2\pi/3, \pi$, los desdoblamientos resultantes son $\delta_{\text{Hald}} = 2, 1, 0 \left[\frac{\Delta}{\pi} \ln \left(\frac{D}{E_d} \right) \right]$. Estos resultados se comparan en la Fig. 8.7.

8.7. Conclusiones

Cuando se presentó el límite SU(4) para $\phi = \pi$ en los **Capítulos 6 y 7**, se señaló que la condición de alta simetría puede romperse por diferentes medios, pero que sin embargo, la física fundamental podía ser entendida con las mismas ideas. En nuestro modelo efectivo, se logra el límite SU(4) para

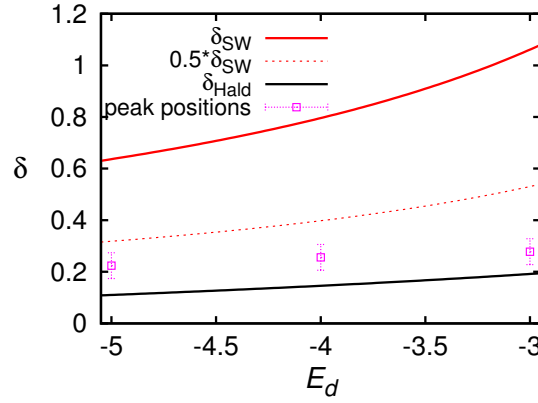


Figura 8.7: Comparación entre el desdoblamiento dado por la Ec. (8.3) y de acuerdo a la teoría de Haldane, por la Ec. (8.4) con la posición de los picos satélite en las densidades de estados.

dobletes degenerados $E_1 = E_2$, con acoplamientos iguales $V_1 = V_2$ a la derecha y a la izquierda, y para $\phi = \pi$. El principal resultado es que en este límite se encuentra interferencia destructiva total en las propiedades de transporte. Cuando la simetría se rompe por un desdoblamiento de los dobletes en energía δ , la conductancia se restablece cuando $\delta > T_K(SU(4))$, la temperatura de Kondo cae abruptamente y dos picos a energía finita aparecen en la conductancia diferencial a $eV_b \sim \pm\delta$.

En este capítulo, se estudió el modelo efectivo para $\phi = 0$ y $\phi = \pm 2\pi/3$. En el primer caso, una de las combinaciones lineales de los dobletes se desacopla de los cables y las propiedades de transporte son las mismas que para un sólo doblete. No hay interferencia. En el segundo caso, la interferencia destructiva es parcial, la temperatura de Kondo se reduce con el respecto a $\phi = 0$, y hay picos secundarios en la conductancia diferencial. Nuestra interpretación de los resultados es que partiendo de $\phi = \pi$, el efecto de $\phi = \pm 2\pi/3$ es mezclar los dobletes introduciendo un desdoblamiento efectivo $\tilde{\delta} \sim V^2/|E_d|$. Cuando E_d es más grande, la separación es más pequeña y hay más interferencia destructiva. Los picos de voltaje finito corresponderían a $\pm\tilde{\delta}$ y la reducción de la temperatura de Kondo sería causada también por este desdoblamiento.

Para que nuestros resultados sean válidos, el acoplamiento a los cables debe ser lo suficientemente pequeño para que los estados excitados, no incluidos en el Hamiltoniano efectivo, no jueguen un papel importante. El efecto de estos estados puede ser estimado para cada caso particular. Por otra parte, no se ha considerado el efecto de los fonones. Esto puede modificar los parámetros efectivos del modelo y también afectar a los fenómenos de interferencia. Esta discusión continúa en el **Capítulo 13**.

El transporte a través de una molécula de benceno es un caso particular de nuestro modelo efectivo para tratar fenómenos de interferencia en sistemas interactuantes. En este contexto, nuestro modelo puede ser pensado como el Hamiltoniano efectivo para el transporte a través de un anillo simé-

trico con un orbital por sitio, incluyendo un singlete y dos dobletes degenerados de una configuración vecina a la del anillo aislado. **El Hamiltoniano efectivo resultante describe situaciones sin embargo más generales.** La interferencia destructiva parcial se produce en general cuando dos niveles con N partículas están cerca a otro con $N \pm 1$ electrones. Por lo tanto, la situación de un singlete y dos dobletes aparece con frecuencia. A partir de los vectores de onda de estos estados, es fácil calcular la fase ϕ del modelo efectivo siguiendo las líneas de este capítulo. **Por lo tanto, nuestro formalismo se puede utilizar en una variedad de sistemas físicamente relevantes.**

PARTE II

Espectroscopía orbital del efecto Kondo

Espectroscopía orbital del efecto Kondo en un sistema de dos puntos cuánticos

"Imagination is more important than knowledge. For knowledge is limited to all we now know and understand, while imagination embraces the entire world, and all there ever will be to know and understand."
A. Einstein.

9.1 El sistema de dos puntos cuánticos.

[9.1.1] Introducción preliminar.

[9.1.2] El Hamiltoniano.

[9.1.3] La corriente.

9.2 Propiedades de transporte de no equilibrio.

[9.2.1] El caso $SU(4)$.

[9.2.2] El efecto del desdoblamiento δ .

9.3 Las densidades de estados fuera de equilibrio.

9.4 La configuración STS.

9.5 Conclusiones.

El efecto Kondo es uno de los fenómenos más estudiados en sistemas de materia condensada fuertemente correlacionados y sigue siendo un tema de gran interés. Observado originalmente en sistemas de impurezas magnéticas en metales, el efecto Kondo ha reaparecido, más recientemente, en el contexto de los sistemas semiconductores de puntos cuánticos (QD), como "impurezas" únicas. El efecto Kondo se caracteriza por la aparición de un estado fundamental de muchos cuerpos singlete formado por el espín de las impurezas y los electrones de conducción en el mar de Fermi. La energía de enlace de este singlete es del orden de la temperatura característica T_K por debajo de la cual los efectos del "apantallamiento" del espín de la impureza se manifiestan en las diferentes propiedades físicas.

La naturaleza de muchos cuerpos de la función de onda Kondo es muy difícil de explorar en el caso de un nivel localizado con degeneración de espín. Las componentes de espín hacia arriba y hacia abajo de la función de onda que entrelazan electrones en la banda de conducción y electrones localizados, no se pueden medir por separado, al menos en una forma limpia y fácil. El punto clave es que sería necesario contar con **sondas resueltas en espín**, para probar estas contribuciones de forma independiente. En un experimento pensado, la aplicación de un campo magnético permitiría el estudio de la evolución de las contribuciones de cada espín a medida que el estado Kondo muere una vez que el desdoblamiento Zeeman supera la temperatura de Kondo.

Como propusieron [Amasha et al. \[2013\]](#), este problema puede evitarse si el sistema tiene degeneración adicional orbital. En el caso de degeneración de espín más orbital, es posible lograr un efecto Kondo más robusto, i.e. con mayor temperatura de Kondo T_K . Desde el punto de vista experimental, esto puede ser realizado en un sistema de dos puntos cuánticos con una fuerte repulsión entre ellos. En algún régimen de parámetros, la energía necesaria para la adición de un electrón en cualquier punto resulta la misma y en ausencia de campo magnético, la degeneración es 4 y el sistema puede ser descrito con un modelo de Anderson SU(4).

Es importante notar que hay cuatro posibles ocupaciones y cuatro bandas de electrones diferentes. Esto es porque cada uno de los puntos está acoplado a un par de cables fuente-sumidero de forma independiente. La función de onda en el régimen de Kondo SU(4) entrelaza electrones localizados en un punto y en el otro con espín hacia arriba y hacia abajo con los electrones de conducción en los cables. En este contexto, la estructura orbital de la función de onda puede ser estudiada, ya que hay sondas resueltas en el índice orbital. Además, es posible aplicar potenciales químicos diferentes con el fin de estudiar el transporte de no equilibrio y la influencia de un punto sobre el otro en la presencia de correlaciones.

La ruptura de la simetría con campo magnético en el caso de degeneración de espín se puede sustituir en este sistema por un campo pseudo-magnético que se controla con voltajes electrostáticos que des-sintonizan las energías de los niveles fuera del punto de degeneración orbital. Los grados de libertad adicionales (orbitales) se identifican como pseudo-espines y este desdoblamiento de energía es como un desdoblamiento pseudo-Zeeman. La ruptura de la simetría conduce a una transición entre el efecto Kondo SU(4) a un SU(2) de un nivel (debido a la degeneración espín restante). El estudio del efecto Kondo en esta transición permite el análisis de la estructura de la función de onda. El efecto de la desdoblamiento de pseudo-espín también se puede detectar en las propiedades de transporte ya que procesos inelásticos se vuelven accesibles y las correlaciones conducen a contribuciones cruzadas no triviales.

En el contexto de nuestro modelo de interferencia introducido en el **Capítulo 5** el efecto Kondo SU(4) y también la transición de SU(4) a SU(2) bajo el efecto de un campo que rompe la simetría fueron analizados en los **Ca-**

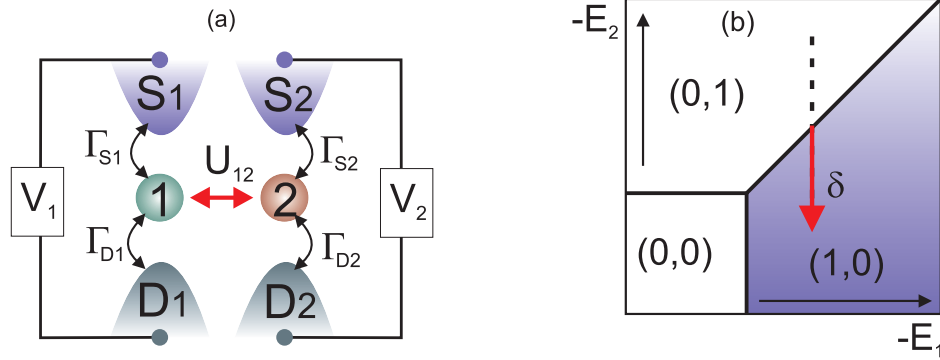


Figura 9.1: (a) Esquema de la configuración experimental. (b) Diagrama de estabilidad que muestra las ocupaciones estables de ambos puntos cuánticos en función de las energías de los niveles localizados respectivos.

pítulos 6 y 7. Con la modificación apropiada, estudiamos la física de la espectroscopía orbital del Kondo bajo la luz de nuestros resultados anteriores. Este es el objeto del presente capítulo.

9.1. El sistema de dos puntos cuánticos

El sistema que ha demostrado recientemente ser adecuado para llevar a cabo la espectroscopía de pseudo-espín del estado Kondo está formado por dos puntos cuánticos acoplados capacitivamente, cada uno conectado a su propio par de cables fuerte-sumidero (véase la Fig. 9.1). El pseudo-espín está definido por la ocupación orbital de uno u otro punto y la espectroscopía puede hacerse mediante el control independiente de los voltajes de los cuatro cables. La ventaja de los puntos cuánticos semiconductores es el gran control de los parámetros. En particular, la ocupación de los puntos cuánticos se puede variar usando tensiones de compuerta.

Antes de la discusión de las propiedades de transporte de este sistema, algunos conceptos importantes se presentan a continuación. Éstos son útiles para comprender los diferentes escenarios de transporte y para tener una idea de cuáles son los parámetros relevantes.

9.1.1. Introducción preliminar

El confinamiento electrostático de los electrones en los puntos cuánticos da lugar a un conjunto de niveles localizados con energías $e_i(N)$ que dependen del número N de electrones. Con el fin de describir las propiedades de transporte es más útil trabajar con un esquema de las energías de adición, es decir, con las energías que corresponden a un nuevo electrón (o agujero) añadido al sistema $e(N-1) - e(N)$ ¹. Esto es muy adecuado cuando la re-

¹A bajas temperaturas es suficiente considerar el estado fundamental para N electrones

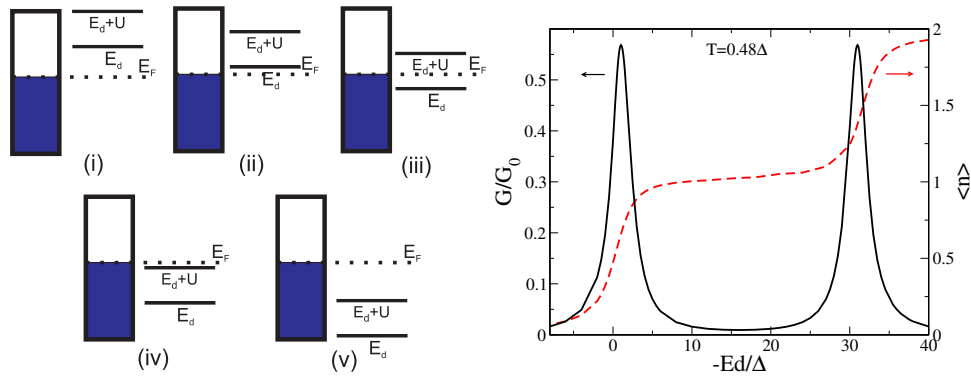


Figura 9.2: (panel izquierdo) Representación de las energías de adición para el nivel localizado en diferentes posiciones con respecto al nivel de Fermi E_F . La parte azul del rectángulo representa los estados ocupados en la banda de conducción. Sólo se considera un nivel de energía E_d . La adición de otro electrón requiere una energía extra U que representa la repulsión de Coulomb. Los diferentes regímenes (ver texto) se llaman: (i) orbital vacío, (ii) y (iv) valencia intermedia, (iii) régimen de Kondo y (v) orbital lleno. (panel derecho) Conductancia de equilibrio G (eje izquierdo) y ocupación (eje derecho) calculadas en respuesta lineal con la aproximación one-crossing (OCA) para diferentes posiciones de E_d . La OCA extiende la NCA a los casos con U finito. G está en unidades de $G_0 = 2e^2/h$, la repulsión de Coulomb es $U = 32$ y la mitad del ancho de banda es $D = 43$. Como se explica en el texto, el comportamiento observado es coherente con los diferentes regímenes que se muestran en el panel izquierdo. Hay dos picos que corresponden a $E_d = E_F$ y $E_d + U = E_F$ donde la ocupación (línea discontinua roja) cambia de 0 a 1 y de 1 a 2, respectivamente.

pulsión de Coulomb no es despreciable. Por ejemplo, el primer electrón se puede añadir pagando una energía E_d y el siguiente, una energía $E_d + U$, para alcanzar el mismo nivel con diferente espín. Aquí U es el costo energético de la repulsión electrón-electrón. En el panel izquierdo de la Fig. 9.2, las energías de adición en el caso de un nivel localizado (E_d y $E_d + U$) están representadas en diferentes posiciones con respecto al nivel de Fermi E_F . La ventaja de los puntos cuánticos semiconductores es que la posición de las energías de adición con respecto al nivel de Fermi se puede controlar con una tensión de compuerta. Esto permite explorar diferentes regímenes de transporte.

En particular, hay puntos interesantes para el transporte donde las energías de adición coinciden con el nivel de Fermi de los electrones de conducción de los cables ². El significado físico de esto es que el costo energético para agregar un electrón en el sistema es cero con respecto al nivel de Fermi, es decir, un electrón de conducción puede ocupar (o dejar) los estados localizados sin pagar energía extra. Esta es la condición resonante.

En el panel de la derecha de la Fig. 9.2, la conductancia (eje izquierdo) y la ocupación (eje derecho) calculadas en el régimen de respuesta lineal se muestran como función de la energía E_d . El cálculo se ha hecho con la aproximación *one-crossing* (OCA) que extiende adecuadamente a la aproxi-

²Supuestos ambos en equilibrio

mación *non-crossing* (NCA) para incluir una repulsión de Coulomb finita U ³ [Haule et al., 2001] [Tosi et al., 2011]. En la figura, $U = 30\Delta$, $E_F = 0$ y la conductancia G está en unidades de $G_0 = 2e^2/h$. El comportamiento de G puede entenderse teniendo en cuenta los diferentes regímenes que se muestran en el panel izquierdo. Cuando la energía E_d es mayor de E_F , no hay estados disponibles para la conexión entre la fuente y el sumidero. Esto se llama **régimen de orbital vacío** y es el caso (i) en el panel izquierdo. La ocupación (línea roja discontinua) y la conductancia son casi cero.

Tan pronto como $E_d \sim E_F$, la conductancia y la ocupación comienzan a crecer. Hay un pico de conductancia, o un salto en la corriente. Esto puede formularse más precisamente en términos del ancho del nivel resonante Δ que cuantifica la intensidad del acoplamiento entre los niveles localizados y las bandas de conducción. La carga comienza a fluctuar entre 0 y 1 tan pronto como $E_d - E_F \lesssim \Delta$. Esto se llama régimen de **valencia intermedia** y es el caso representado en (ii). Es interesante notar que no hay dos electrones que entran al sistema al mismo tiempo. Esto es debido al costo de energía U de la repulsión de Coulomb. Este efecto se llama **bloqueo de Coulomb** y es importante cuando $U \gg \Delta$.

En el rango de energía $E_F - E_d \gg \Delta$ y $E_d + U - E_F \gg \Delta$, la ocupación está fija en 1 (véase el caso (iii) en el panel izquierdo de la figura). Este es el régimen de **Kondo**. Para tensiones de compuerta inferiores (caso (iv)), $E_F - (E_d + U) \leq \Delta$ la ocupación fluctúa entre 1 y 2. Este es también un régimen de valencia intermedia. Hay otro pico de la conductancia en $E_d + U = E_F$ debido a la adición del segundo electrón en la condición de resonancia. El nivel está finalmente ocupado con dos electrones (caso (v)) y la conductancia cae a cero.

Entre los diferentes escenarios, un comportamiento muy interesante se encuentra en el régimen de Kondo a bajas temperaturas. En este régimen, la ocupación total es aproximadamente uno. El nivel localizado puede ser ocupado con un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo. Hay un costo de energía para que los electrones salten del nivel localizado. Sin embargo, hay **procesos virtuales** que involucran a electrones en el nivel localizado y en la banda de conducción como se ilustra en la Fig. 9.3. Las bandas de conducción de espín hacia arriba y hacia abajo se muestran por separado para enfatizar la doble degeneración. Los rectángulos azules representan los estados ocupados en la fuente y el sumidero; el nivel de Fermi se indica con una línea a trazos. En el estado inicial, el nivel localizado está ocupado con un electrón de espín para arriba. En un proceso virtual, el electrón salta a la banda de conducción del espín correspondiente dejando un agujero. En el estado final, otro electrón ocupa el nivel localizado. El proceso virtual donde los electrones que ocupan la impureza tienen el mismo espín que en el estado inicial, llevan a una vida media finita del nivel localizado. Ellos son los responsables del ancho del nivel, es decir, el ancho del nivel resonante. Como se muestra en la Fig. 9.3, un electrón con espín hacia abajo puede ocupar el nivel vacío. En este proceso hay una **inversión de espín**. Los pro-

³Incluyendo correcciones de vértice.

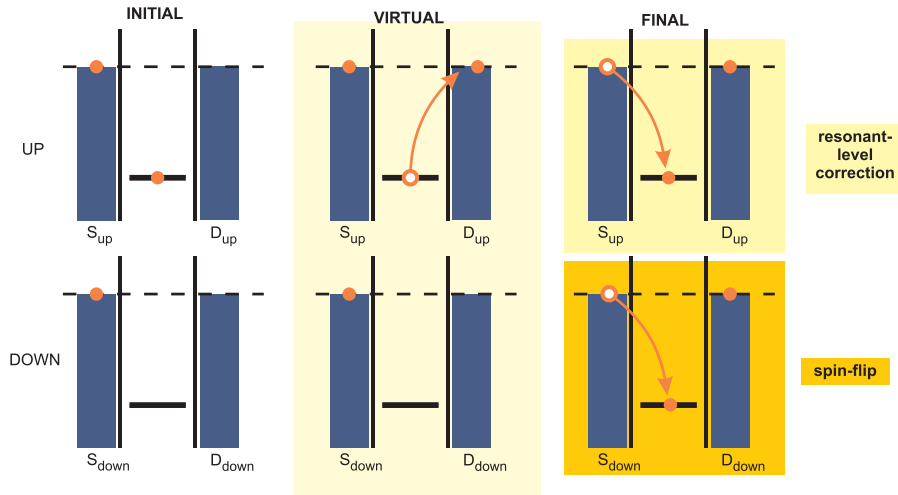


Figura 9.3: Representación de los procesos virtuales de flipo de espín en el régimen de Kondo. Por claridad las bandas de electrones de conducción de diferente espín se muestran por separado. La parte azul corresponde a los estados ocupados en los reservorios a izquierda y derecha. En el estado inicial, el nivel localizado está ocupado con un electrón de espín hacia arriba. En el proceso virtual, el electrón salta a la banda de conducción del espín hacia arriba (cerca del nivel de Fermi) dejando un agujero que puede ser llenado con otro electrón del mismo espín o con un electrón de la banda de conducción de espín hacia abajo. El primer caso (corrección de nivel resonante) conduce a una renormalización de la energía y una vida media finita para el electrón en el nivel localizado. El segundo caso, donde hay inversión del espín, conduce al efecto Kondo.

cesos de inversión de espín producen correlaciones entre los electrones en el nivel localizado y en las bandas de conducción. Este es el origen del **efecto Kondo**. Si se tienen en cuenta todos estos posibles procesos virtuales, hay un “apantallamiento” efectivo del momento magnético medio representado por el nivel degenerado, y el estado fundamental es una función de onda de muchos cuerpos singlete que entrelaza electrones localizados y de conducción. Hay una energía característica T_K en la que estas correlaciones se vuelven dominantes.

Los electrones de conducción que participan en el estado de muchos cuerpos Kondo son principalmente aquellos cuyas energías están cerca del nivel de Fermi. La característica distintiva del efecto Kondo es un incremento de la densidad de estados del nivel localizado en la energía de Fermi. Esto puede ser interpretado como una consecuencia de la probabilidad finita de encontrar los electrones localizados en el nivel de Fermi. Una secuencia de “fotos” de la densidad de estados en función de la temperatura se muestra en la Fig. 9.4. El resultado corresponde a un cálculo con U-NCA ⁴ [Tosi et al., 2011]. La energía del nivel localizado es $E_d = -2.85$ y la repulsión de Coulomb $U = 5.71$. La unidad de energía es $\Delta = 1$. El nivel de Fermi se fija en cero, $E_F = 0$. A altas temperaturas (panel superior izquierdo) hay dos picos anchos que corresponden a las energías adición $\omega = E_d$ y $\omega = E_d + U$.

⁴NCA con U finito

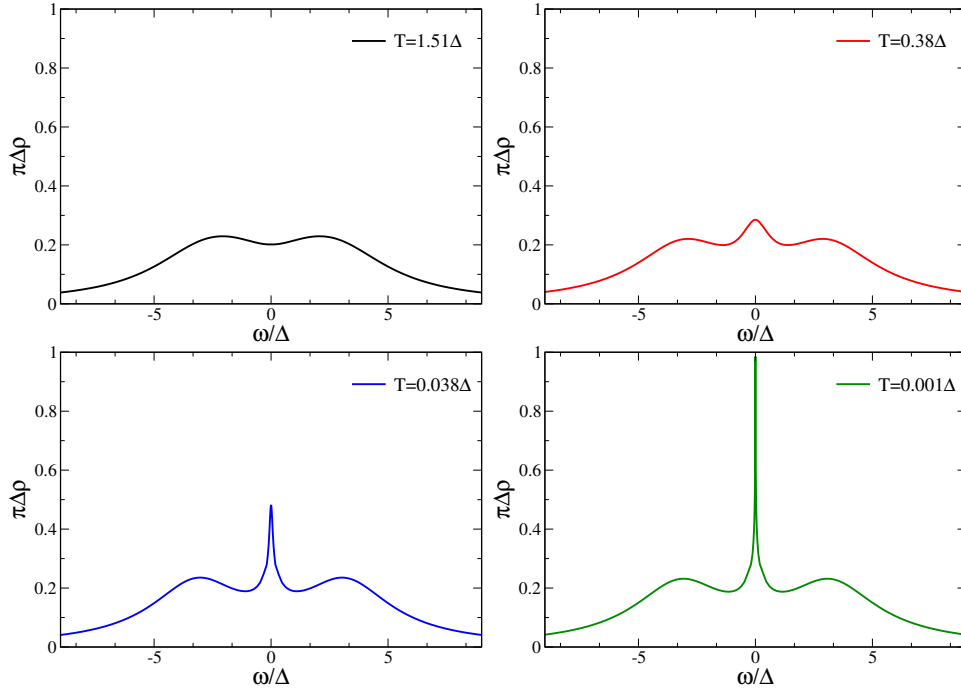


Figura 9.4: Evolución con temperatura de la densidad de estados del nivel localizado en el régimen de Kondo. La energía $E_d = -2.85$, $U = 5.71$ y $D = 11.43$. $\Delta = 1$ es la unidad de energía. Los resultados corresponden a un cálculo con U-NCA. A altas temperaturas (panel superior izquierdo) hay dos picos en la densidad de estados que corresponden a las energías adición de E_d y $E_d + U$ (véase el panel izquierdo de la Fig. 9.2). A medida que la temperatura disminuye, hay un aumento de la densidad de estados en el nivel de Fermi, $E_F = 0$. Esta es una de las características identificatorias del efecto Kondo. Los electrones que participan en el estado de muchos cuerpos son principalmente aquellos con energías cerca de E_F .

A medida que la temperatura disminuye, hay un aumento de la densidad de estados en $\omega = 0$. Esta una de las firmas del efecto Kondo.

Este incremento de la densidad de estados del nivel localizado se observa en las propiedades de transporte como un aumento de la conductancia a voltaje cero. Esto está sugerido en la ilustración de la Fig. 9.3. En el régimen de Kondo, los electrones pueden pasar de la fuente al sumidero a través de los procesos virtuales de inversión de espín. El comportamiento de la conductancia es diferente al que se muestra en el panel derecho de la Fig. 9.2 a temperaturas más bajas ($T < T_K$) y una meseta aparece entre los dos picos. A $T = 0$, la conductancia sería constante e igual a $2e^2/h$ en la región entre los dos picos de conductancia.

Estas características esenciales son muy útiles para entender el sistema de dos puntos cuánticos. Cada uno de los puntos tiene un conjunto discreto de niveles de energía. Si los puntos cuánticos no interactúan, es decir, si no hay repulsión mutua (y no hay *tunneling* entre ellos), la ocupación de cualquiera de los puntos puede ser considerada por separado. Como se ha explicado, estas ocupaciones se pueden controlar con tensiones de compuer-

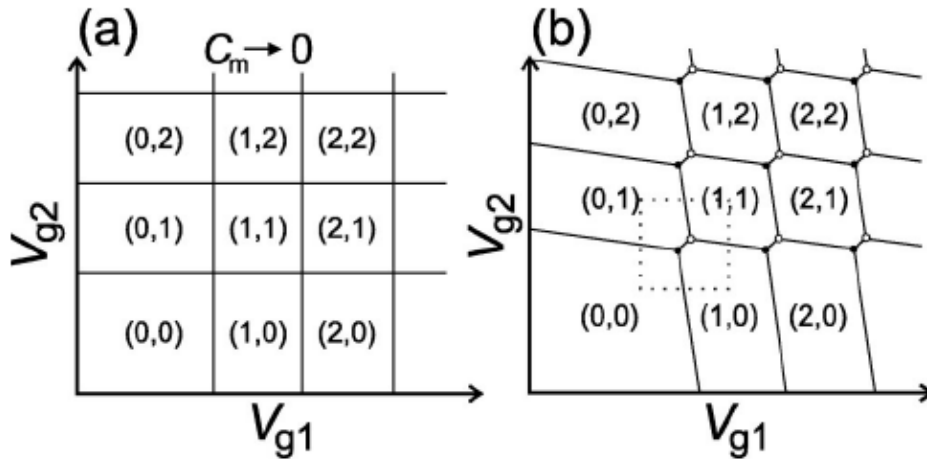


Figura 9.5: Mapa de estabilidad para un sistema de dos puntos cuánticos que muestra la ocupación estable de cada punto (N_1, N_2) en función de los voltajes de compuerta V_{g1} y V_{g2} . En (a) no hay intercomunicación entre los puntos cuánticos y la variación de uno de los voltajes de compuerta no afecta al otro punto. Además, los puntos son independientes (no interactuantes). En (b) no solo hay una intercomunicación indicada por la inclinación de las líneas, sino también hay una repulsión entre los puntos. Esto convierte a los rectángulos de ocupaciones estables en hexágonos. Hay líneas de coexistencia que separan configuraciones con el mismo número total de electrones.

ta V_{gi} . Puesto que hay dos puntos cuánticos, es posible construir un mapa de las ocupaciones estables (N_1, N_2) en función de V_{g1} y V_{g2} . Esto se muestra en la Fig. 9.5. En (a) las ocupaciones estables se muestran en el caso en que los puntos cuánticos son independientes y no hay intercomunicación. El mapa de ocupación tiene forma de tablero de ajedrez. A V_{g2} fijo, la ocupación se puede variar de $(N_1, N_2) \rightarrow (N_1 + 1, N_2) \rightarrow (N_1 + 2, N_2)$ con V_{g1} y análogamente, a V_{g1} fijo, condiciones diferentes $(N_1, N_2) \rightarrow (N_1, N_2 + 1) \rightarrow (N_1, N_2 + 2)$ se pueden encontrar cambiando V_{g2} . En general, las tensiones de compuerta no actúan independientemente. Si hay alguna intercomunicación, i.e. si la variación de V_{g1} afecta a la energía del segunda dot o viceversa, las líneas en el mapa de estabilidad dejan de ser horizontales y verticales. Las energías de adición son, en general, $E_i = \alpha_{i1} V_{g1} + \alpha_{i2} V_{g2}$.

Como se muestra en la Fig. 9.5(b), es también posible tener una repulsión de Coulomb entre puntos (mediante un acoplamiento capacitivo). Esto significa que cuando hay un electrón en uno de los puntos, por ejemplo, en el punto 1, hay un costo de energía adicional a pagar U_{12} para añadir un electrón en el punto 2. Esta repulsión entre puntos cambia la forma del mapa a un panel de abejas. Los hexágonos son las regiones de ocupaciones estables. En este caso, para el sistema aislado, sólo el número total de electrones $N_1 + N_2$ es un buen número cuántico. Hay líneas de coexistencia en el mapa que separan configuraciones con el mismo número total de electrones. En las líneas de coexistencia, dos configuraciones son equivalentes.

Cada vez que hay un número impar de electrones en uno de los puntos

es posible tener efecto Kondo, dependiendo del acoplamiento a los cables y de la temperatura. Además, es posible tener una mayor simetría si los parámetros se ajustan para estar en la línea de coexistencia. En este caso, hay degeneración adicional debido a las posibles configuraciones orbitales. Esta condición es adecuada para observar efecto Kondo SU(4). Como se muestra en la Fig. 9.1(b), la física discutida en este capítulo corresponde a un régimen cercano a este punto de degeneración orbital.

9.1.2. El Hamiltoniano

Nuestro modelo para este problema de dos puntos cuánticos (DQD) cerca de la simetría SU(4) considera una configuración singlete mezclada con dos dobletes de espín $|i\sigma\rangle$ correspondientes a un electrón adicional (o agujero) en el QD i . El Hamiltoniano para nuestro modelo se puede separar como $H = H_L + H_R + H_C + H_{MIX}$, donde

$$H_\nu = \sum_{k,\nu,i,\sigma} \epsilon_{k,\nu,i,\sigma} c_{k\nu i\sigma}^\dagger c_{k\nu i\sigma},$$

describe los cuatro cables metálicos marcados con ν (izquierda y derecha; o también llamados fuente y sumidero) que están acoplados al punto i . En nuestro modelo, los dos puntos cuánticos en la región central se describen con dos dobletes con energías E_i , $i = 1, 2$ y una repulsión electrostática infinita entre puntos y dentro de cada punto

$$H_C = \sum_{i,\sigma} E_i d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \text{Coulomb repulsion.}$$

Esto significa que la doble ocupación de cada punto está prohibida (el costo de energía es demasiado alto) y que tampoco es posible tener dos electrones en total en el sistema. Como se muestra con una flecha roja en la Fig. 9.1(b), la simetría se reduce a SU(2) por un desdoblamiento pseudo-Zeeman $\delta = E_2 - E_1$, que eleva la energía de una partícula en QD2 (E_2) con respecto a la correspondiente para QD1 (E_1).

El acoplamiento entre los cables y los puntos viene dado por el Hamiltoniano de hibridación,

$$H_{MIX} = \sum_{k\nu i\sigma} V_{\nu i} \left(c_{k\nu i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + H.c. \right),$$

donde tomamos una hibridación independiente del impulso. Los acoplamientos túnel de cada QD a la fuente y al sumidero son Γ_{Si} y Γ_{Di} , respectivamente, y tomamos como unidad de energía $\Gamma_i = \Gamma_{Si} + \Gamma_{Di} = 1$ a menos que se indique lo contrario⁵.

En los sistemas reales, $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$ y la simetría SU(4) se pierde incluso para $\delta = 0$. Sin embargo, como se discute en el **Capítulo 10**, sintonizando

⁵La matriz de hibridación se define en general como $\Gamma_{\nu n, \nu m}(\omega) = 2\pi \sum_{k \in \nu n} V_{\nu n}(\omega) V_{\nu m}^*(\omega) \delta(\omega - \epsilon_k)$, donde el índice n, m incluyen espín.

apropiadamente las energías de los niveles, las densidades espectrales de equilibrio para ambos puntos $\rho_i(\omega)$ se pueden hacer coincidir a bajas temperaturas. Esto indica que la simetría SU(4) se recupera como una simetría emergente (aproximada) a bajas temperaturas.

9.1.3. La corriente

La corriente total con este Hamiltoniano se puede calcular sumando la contribución de ambos puntos $I = \sum_n I_n$, con

$$I_n = \frac{ei}{2h} \int d\omega \sum_{\sigma} \{ [\Gamma_{Sn\sigma}(\omega) f_{Sn}(\omega) - \Gamma_{Dn\sigma}(\omega) f_{Dn}(\omega)] [G_{n,n\sigma}^r - G_{n,n\sigma}^a](\omega) + [\Gamma_{Sn\sigma}(\omega) - \Gamma_{Dn\sigma}(\omega)] G_{n,n\sigma}^<(\omega) \}.$$

donde f_{Sn} (f_{Dn}) es la función de Fermi de los electrones en la fuente (el sumidero) acoplados al punto n , los coeficientes de la matriz de hibridación son $\Gamma_{\nu n\sigma}(\omega) = \frac{\pi}{D} V_{\nu n} V_{\nu n}^*$, con una banda plana aproximada de ancho $2D$ en torno a la energía de Fermi de cada cable. Las funciones de Green involucradas en el cálculo de la corriente son las de no-equilibrio definidas en el formalismo Keldysh (en condiciones estacionarias) como

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^<(t-t') &= +i\langle d_{j\sigma}^\dagger(t') d_{i\sigma}(t) \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^>(t-t') &= -i\langle d_{i\sigma}(t) d_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^r(t-t') &= -i\theta(t-t') \langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle, \\ G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^a(t-t') &= +i\theta(t'-t) \langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle. \end{aligned}$$

Utilizando la relación $(G^r - G^a)(\omega) = (G^> - G^<)(\omega)$,

$$I_n = \frac{ie}{h} \int d\omega [(\Gamma_{Sn} f_{Sn}(\omega) - \Gamma_{Dn} f_{Dn}(\omega)) G_{n\sigma}^>(\omega) + (\Gamma_{Sn\sigma}(1 - f_{Sn}(\omega)) - \Gamma_{Dn\sigma}(1 - f_{Dn}(\omega))) G_{n\sigma}^<(\omega)],$$

y el factor de 2 proviene de la suma sobre espín.

Estas funciones de Green de no equilibrio se calculan utilizando la aproximación *non-crossing* (NCA). Los detalles se presentan en el **Apéndice D**.

9.2. Propiedades de transporte de no equilibrio

9.2.1. El caso SU(4)

El punto de partida es el análisis de las propiedades de transporte en el caso más simétrico SU(4). Puesto que todas las hibridaciones son las mismas, se encuentra una degeneración de cuatro para $\delta = 0$, i.e. para $E_1 = E_2$. Como se muestra en el esquema de la Fig. 9.1, cada uno de los puntos cuánticos está conectado a su propio par de cables fuente-sumidero. Es habitual

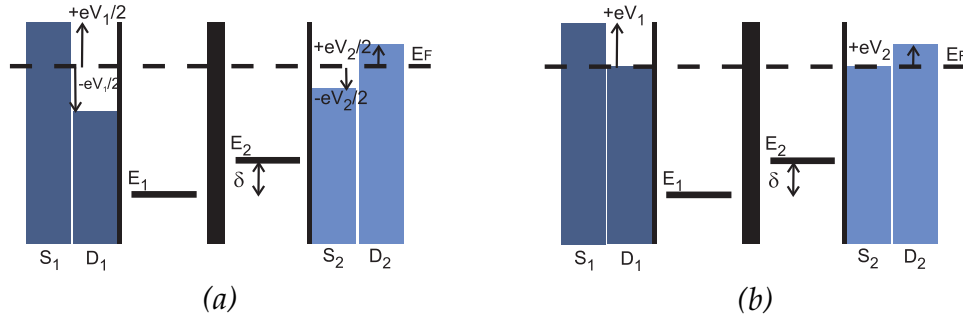


Figura 9.6: Convención para la aplicación de los voltajes V_i . Ambos puntos cuánticos QD1 (izquierda) y QD2 (derecha) están representados juntos. (a) Caída de tensión simétrica: cada uno de los potenciales electro-químicos se modifica con $\pm V_i/2$. (b) Caída de tensión asimétrica: toda la caída de tensión ocurre en el reservorio conectado a la fuente.

considerar que para que una determinado voltaje aplicado V_b , la tensión cae **simétricamente**. Esto significa que los potenciales electroquímicos de la fuente y el sumidero se modifican en la misma cantidad $\pm V_b/2$. Esta convención se ilustra en la Fig. 9.6(a). Los niveles de energía de ambos puntos cuánticos se representan a la par separados por una barrera túnel grande que indica que el *tunneling* entre puntos es insignificante. La caída de tensión depende de la resistencia de contacto. En un dispositivo semiconductor, no se esperan grandes asimetrías y el caso simétrico es más apropiado. Si las resistencias de contacto en la fuente y el sumidero son diferentes (como en el transporte a través de moléculas), la caída de tensión puede ser bastante **asimétrica** donde sólo uno de los potenciales químicos de los cables se modifica. Este caso se muestra en la Fig. 9.6(b). Si el nivel localizado está más hibridado con el cable que permanece en equilibrio, la configuración de aplicación de la tensión es como en un experimento de microscopía túnel de barrido (STM). La conductancia diferencial es sensible a la densidad de estados. En la discusión que sigue se considera una caída de tensión simétrica. Vale la pena comentar que en este caso la corriente es una función impar del voltaje V_b y la conductancia es, por tanto, par.

Los parámetros del sistema de dos puntos cuánticos están sintonizados para explorar las propiedades de transporte cerca del punto de degeneración orbital mostrado en la Fig. 9.1(b). Hay un número total impar de electrones (escogido aquí igual a 1). Las energías de los dos puntos cuánticos son las mismas, $E_1 = E_2 = -4$. En equilibrio, los cuatro cables tienen el mismo potencial electro-químico fijado a cero, $E_F = 0$. Cada uno de los puntos se mezcla con una combinación lineal de estados de conducción de fuente y sumidero⁶. A bajas temperaturas, las correlaciones entre los electrones localizados (que puede tener espín hacia arriba o hacia abajo, o pueden estar en QD1 o QD2) y los electrones en los cables dan lugar a un efecto Kondo

⁶La otra combinación lineal se desacopla de la Hamiltoniano.

SU(4)⁷.

El estado Kondo es un estado de muchos cuerpos complicado que entrelaza electrones localizados y de conducción en un singlete. La función de onda tiene contribución de ambos puntos cuánticos. En el montaje de transporte, los potenciales químicos de cada punto se pueden variar independientemente, V_i . Esto permite sondear el carácter orbital de la función de onda. En el efecto Kondo SU(2) de un nivel, esto es muy difícil de lograr debido a la dificultad que representa tener sondas resueltas en espín.

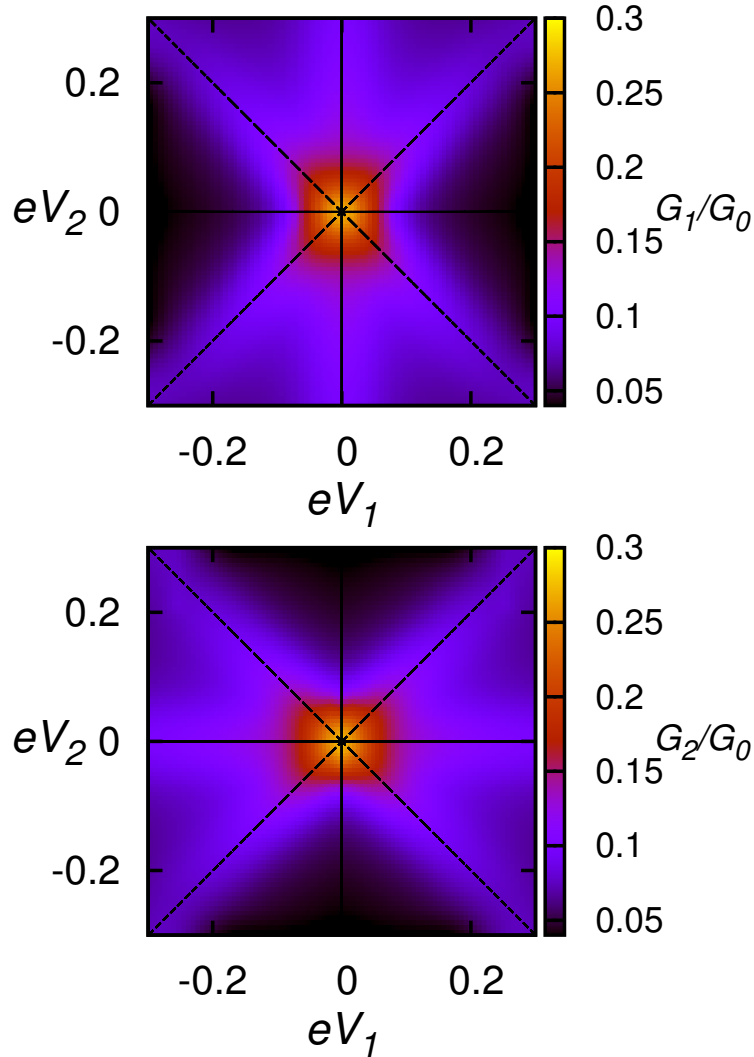


Figura 9.7: Conductancia diferencial de QD1 y QD2 en función de V_1 y V_2 para $\delta = 0$, $E_1 = E_2 = -4$ y $T = 0.005$. Las líneas de trazos corresponden a $V_1 = \pm V_2$.

La conductancia diferencial del QD1 $G_1 = dI_1/dV_1$ y QD2 $G_2 = dI_2/dV_2$ en el caso simétrico SU(4) se muestran en la Fig. 9.7 como función de V_1 y V_2 . Para simetría SU(4), G_1 y G_2 tienen la misma forma intercambiando

⁷Para repulsión de Coulomb finita U_i en cada punto y U_{12} entre ellos, el sistema se puede describir con un modelo con simetría SU(4) sólo cuando $U_1 = U_2 = U_{12}$ [Galpin et al., 2005]

V_1 y V_2 . Hay cuatro comportamientos diferentes para discutir: (i) Para $V_1 = V_2 = 0$, hay un máximo de la conductancia ligeramente por debajo de $G_0 = 2e^2/h$ debido al efecto Kondo SU(4). (ii) La aplicación de V_1 o V_2 tiende a disminuir de la conductancia. La aplicación de V_1 (V_2) tiene un efecto más fuerte en la disminución de G_1 (G_2) que V_2 (V_1). Al igual que en el efecto Kondo habitual SU(2), $G_i(V_i)$ cae a la mitad de su valor de $V_i = 0$ a una tensión tal que $eV_i \approx T_K^{SU(4)}$, donde $T_K^{SU(4)}$ es la temperatura de Kondo para $\delta = 0$. (iii) Para $V_1 = 0$ ($V_2 = 0$), hay un efecto Kondo SU(2) que se observa en G_1 (G_2), independientemente de V_2 (V_1). (iv) Efectos no triviales de las correlaciones entre los dos puntos cuánticos son evidentes en el hecho de que G_i aumenta en las líneas de $V_1 = \pm V_2$ (líneas negras punteadas). Este punto en particular se relaciona con la evolución de la densidad de estados $\rho_1(\omega)$ ($\rho_2(\omega)$) a medida que V_2 (V_1) es variado y se discute más adelante.

(i) La principal característica del caso SU(4) es que hay más procesos virtuales posibles. Siguiendo la misma idea presentada en la Fig. 9.3 para simetría SU(2), los procesos virtuales en este contexto se ilustran en la Fig. 9.8. Hay cuatro estados degenerados $|i\sigma\rangle$, cada uno acoplado a su propia banda de conducción. Las bandas de conducción conectados a QD1 y QD2, con espín hacia arriba y hacia abajo, se muestran por separado para enfatizar esta degeneración de cuatro. En el estado inicial un electrón ocupa el QD1 con espín hacia arriba. En un proceso virtual, este electrón salta a la banda de conducción QD1-up, dejando un agujero. Otro electrón de cualquiera de las cuatro bandas puede ocupar este agujero. De esta manera, $|1 \uparrow\rangle$ puede pasar a $|1 \downarrow\rangle$ en un proceso de inversión de espín, a $|2 \uparrow\rangle$ en un proceso inversión de pseudo-espín o también a $|2 \downarrow\rangle$ con ambas, inversión de espín y de pseudo-espín. Estas correlaciones entre los electrones localizados y de conducción originan el efecto Kondo.

En el régimen de Kondo, $-E_d \gg \Delta$, el número total de electrones en el sistema está fijo en uno. Puesto que hay cuatro estados degenerados, la ocupación de cada uno de ellos es ligeramente inferior a $1/4$ a bajas temperaturas (debido a la ocupación del singlete). Según la regla de suma de Friedel, la densidad de estados en el nivel de Fermi tiende a $\rho_{i\sigma}(\epsilon_F) = \frac{1}{\pi\Delta_{i\sigma}} \sin^2(\pi/4) = 0.5 \frac{1}{\pi\Delta_{i\sigma}}$. La conductancia total a cero voltaje y a temperatura cero sería $G = e^2/h \sum_{i\sigma} \pi\Delta_{i\sigma} \rho_{i\sigma}(\epsilon_F) = 0.5 e^2/h \sum_{i\sigma}$. Esto significa una conductancia total de $G = 2e^2/h = G_0$ y una conductancia $G_i = 0.5G_0$ por QD a muy baja temperatura. Es muy interesante notar que, aunque hay cuatro estados, la conductancia total no satura en $4e^2/h$ debido a la ocupación parcial de cada uno.

(ii) El efecto del voltaje V_i es reducir la conductancia G_i abruptamente. La idea es que los electrones de conducción que participan en los procesos virtuales están ahora termalizados en dos potenciales químicos diferentes. Como se discutió en el **Capítulo 6** la resonancia Kondo se desdobra en dos picos situados en $\pm V_i/2$ y la conductancia cae. En cierto sentido, hay un efecto Kondo con la fuente y el sumidero por separado y, por tanto, no aumenta la conductancia en el nivel de Fermi. Esto se ilustra en la Fig. 9.9. Los procesos virtuales están representados para uno de los puntos cuánticos

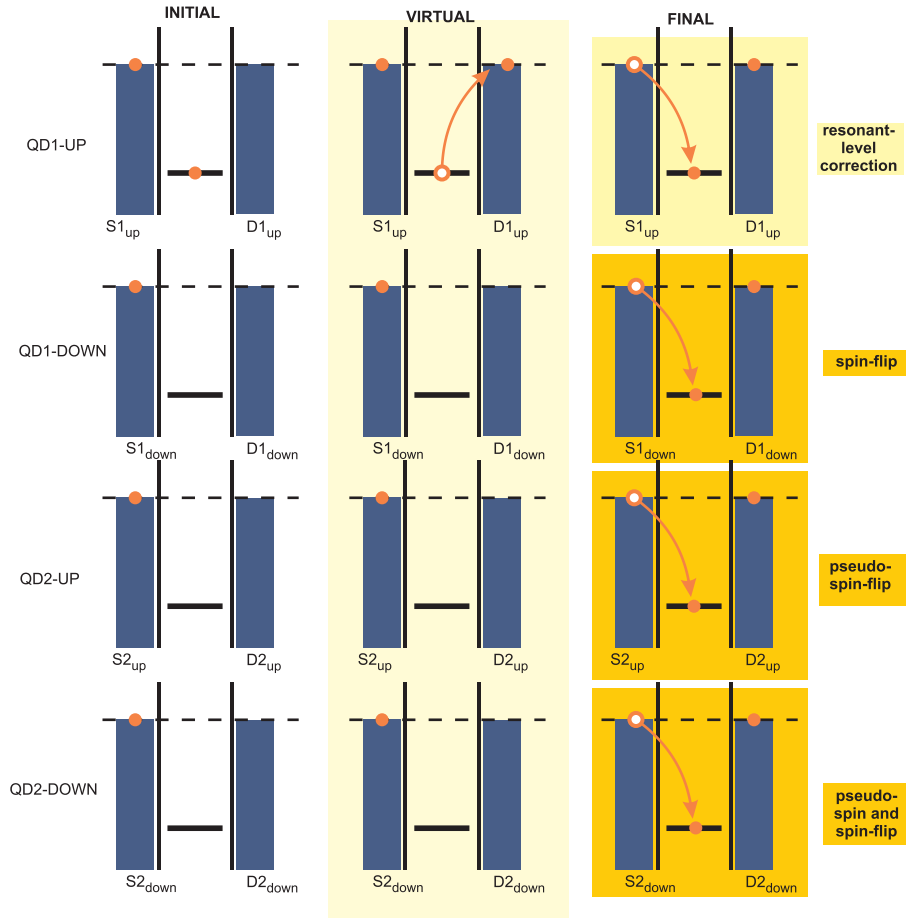


Figura 9.8: Representación de los procesos virtuales en el límite de simetría $SU(4)$. La convención es como en la Fig. 9.3. Hay cuatro bandas de conducción correspondientes a QD1 y QD2, con sus respectivas proyecciones de espín. El sistema está en equilibrio. En el estado inicial, un electrón con espín hacia arriba está ocupando el QD1. En un proceso virtual, el electrón salta a la banda de conducción QD1-up. El agujero que queda puede ser ocupado por un electrón de cualquiera de las bandas. Hay procesos de inversión de espín. Hay procesos de inversión de pseudo-espín en los que los electrones en el estado final están en QD2. También es posible invertir el espín y el pseudo-espín simultáneamente. Todos estos procesos conducen a las correlaciones que originan el efecto Kondo $SU(4)$.

cos, teniendo en cuenta sólo la degeneración de espín. En el estado inicial un electrón con espín hacia arriba ocupa el nivel localizado. En un proceso virtual, el electrón puede saltar a la fuente (flecha rosa) o al sumidero (flecha naranja). En el estado final, un electrón con el mismo u opuesto espín puede ocupar el nivel. La energía debe conservarse por lo tanto hay una mezcla separada con fuente y sumidero. La conductancia $G_i(V_i)$ cae a la mitad de su valor de $V_i = 0$ a una tensión tal que $eV_i \approx T_K^{SU(4)}$, donde $T_K^{SU(4)}$ es la temperatura de Kondo.

(iii) El efecto de V_2 (V_1) en dI_1/dV_1 (dI_2/dV_2) es diferente al de V_1 (V_2). La explicación anterior ayuda a comprender que el aumento de la conductancia

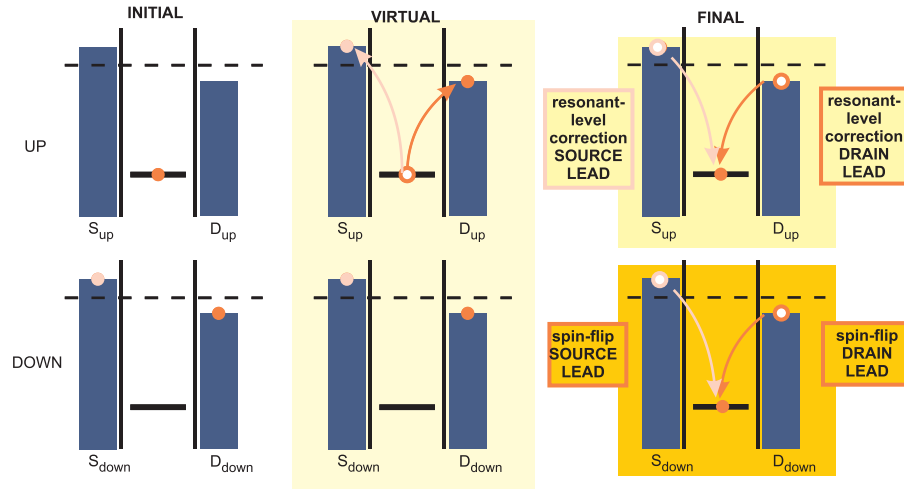


Figura 9.9: Representación de los procesos virtuales para uno de los QDs en el régimen de Kondo cuando se aplica un voltaje V_b . Sólo la degeneración espín se considera en este caso, para uno de los QDs. En el estado inicial de un electrón con espín hacia arriba ocupa el nivel localizado. En un proceso virtual, el electrón salta a la fuente (flecha rosa) o al sumidero (flecha naranja). En contraste con el caso de equilibrio, para $V_b \neq 0$ estas dos bandas de conducción no son equivalentes.

por el efecto Kondo SU(4) se pierde debido a la división en el potencial químico de los dos cables conectados a QD1 (QD2). Sin embargo, hay una degeneración de espín restante y si el QD1 (QD2) se mantiene en equilibrio, hay un pico a voltaje cero en la conductancia G_1 (G_2) como consecuencia del efecto Kondo SU(2). Esto se observa claramente en la Fig. 9.7 en la línea de $V_1 = 0$ ($V_2 = 0$). Los procesos virtuales para $V_2 = 0$ y V_1 arbitrario se ilustran en la Fig. 9.10.

(iv) Se puede observar en la Fig. 9.7 (líneas de trazos) que la conductancia aumenta en las líneas de $V_1 = \pm V_2$. Este es un **efecto inelástico de no equilibrio**. Una ilustración de los procesos virtuales en esta condición de voltaje se muestra en la Fig. 9.11. En el estado inicial hay electrón en QD1 con espín hacia arriba. En un proceso virtual este electrón salta a la fuente QD1 (flecha rosa) o sumidero (flecha naranja). Cuando $V_1 = V_2$ es posible tener las contribuciones de los electrones de conducción en los cables conectados a QD1 y también a QD2. En el estado final un electrón puede estar perfectamente en QD2 (invirtiendo el pseudo-espín) con el mismo o distinto espín. El efecto de QD1 (QD2) en la conductancia diferencial dI_2/dV_2 (dI_1/dV_1) es una consecuencia de las correlaciones orbitales. En esta condición particular, aunque V_1 y V_2 son diferentes de cero, la conductancia G_2 (G_1) tienen una contribución de la densidad de estados de QD1 (QD2). La densidad de estados de un punto es modificada por el voltaje en el otro punto. Estas correlaciones cruzadas son muy interesantes y son una consecuencia de la simetría SU(4).

La variación de las densidades de estados se puede observar en la Fig. 9.12. En la figura, la densidad de estados de QD1 se muestra para dos con-

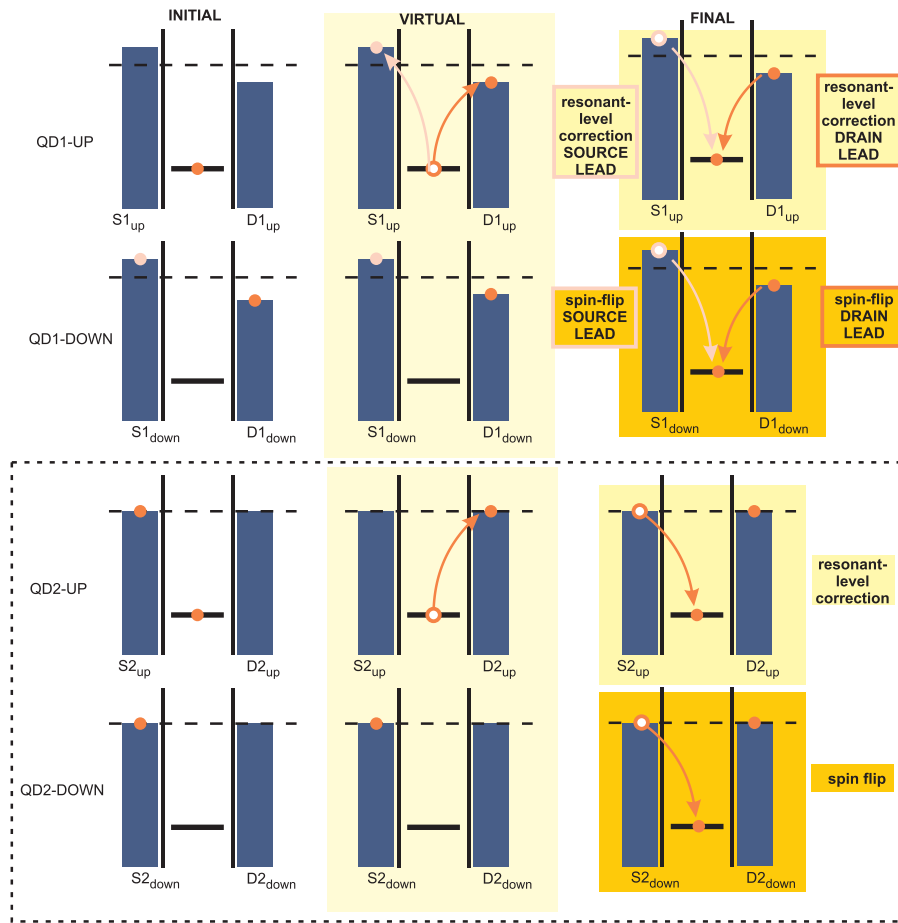


Figura 9.10: Representación de los procesos virtuales en el límite de simetría SU(4) cuando hay un voltaje aplicado entre la fuente y el sumidero conectados a QD1 mientras QD2 permanece en equilibrio. Si en el estado inicial del electrón está en QD1, el efecto del voltaje es desdoblar la resonancia Kondo como se representa en la Fig. 9.9. Por el contrario, si en el estado inicial el electrón está en QD2 (cuadro indicado con línea a trazos), la degeneración de espín conduce a un efecto Kondo SU(2) y a un pico a voltaje cero en la conductancia de QD2. Se muestra explícitamente cómo el efecto Kondo permite a los electrones ir desde la fuente al sumidero coherentemente.

diciones diferentes. En (a) $V_1 = 0$ y V_2 cambia de 0 a 0.3. Se puede observar que ρ_1 es modificada por la aplicación de voltaje en el punto 2, como consecuencia de las correlaciones orbitales. Esto se puede comparar con el mapa para G_1 que se muestra en la Fig. 9.7 y comprender con la ayuda de la Fig. 9.10. En (b) la densidad de estados se muestra para $V_1 = V_2$ mientras V_2 cambia de 0 a 0.3. Se puede observar que la densidad de estados es mayor en la línea de $V_1 = \pm V_2$. Esto es razonable de acuerdo a los procesos posibles mostrados en la Fig. 9.11.

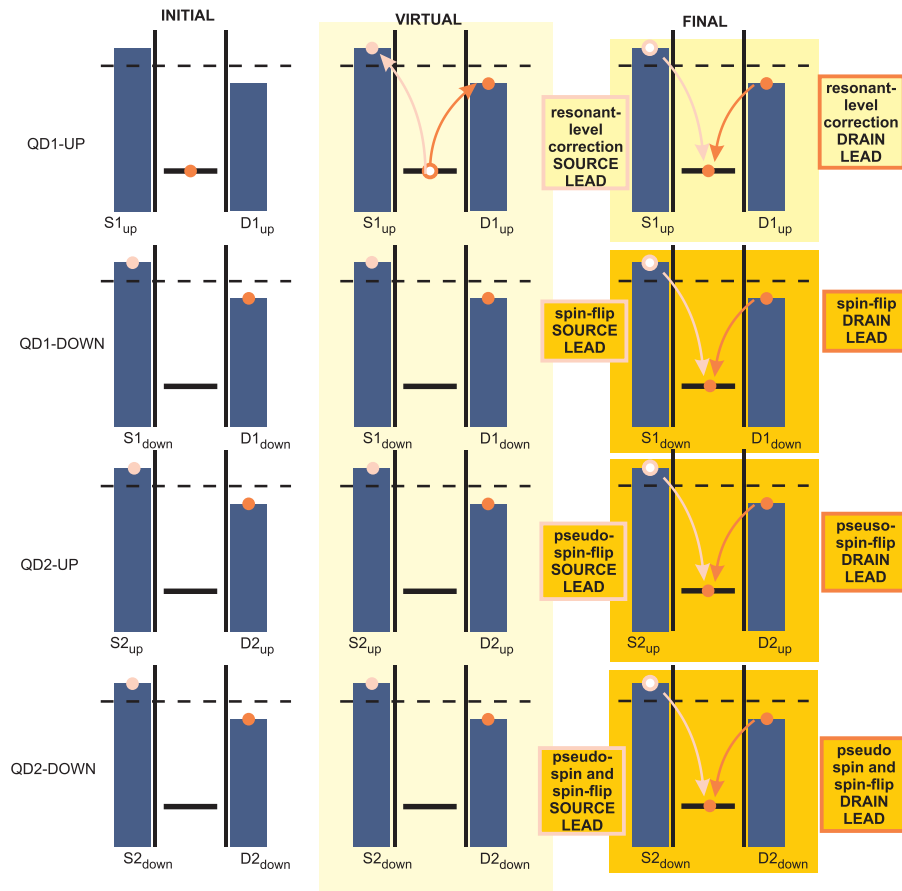


Figura 9.11: Representación de los procesos virtuales en el régimen de Kondo con simetría $SU(4)$ bajo la aplicación de voltajes V_1 y $V_2 = V_1$. En contraste con el caso discutido en la Fig. 9.10, cuando $V_1 = V_2$ es posible tener las contribuciones de los electrones de conducción en los cables conectados a QD1 y QD2. El acoplamiento ocurre con fuente y sumidero separadamente. Es una especie de efecto Kondo con simetría $SU(4)$ para los electrones en $\mu = \pm V_1/2$.

9.2.2. El efecto del desdoblamiento δ

En el sistema de dos puntos cuánticos los parámetros han sido sintonizados en un punto especial donde $E_1 = E_2$ y es posible tener efecto Kondo $SU(4)$ a bajas temperaturas. Aparte del espín, hay una degeneración orbital adicional ya que las configuraciones con un electrón en QD1 o QD2 son equivalentes. Las energías de los niveles de energía en cada punto se pueden variar con tensiones de compuerta. Como se muestra en el diagrama de estabilidad de la Fig. 9.1(b), es posible mover una de las energías E_2 con respecto a la otra, E_1 . Esto es como tener un campo rompiendo la simetría que levanta la degeneración orbital. Con respecto a este grado de libertad de pseudo-espín, el efecto de las compuertas electrostáticas puede ser pensado como un desdoblamiento pseudo-Zeeman. La simetría $SU(4)$ se pierde.

El efecto de una ruptura de simetría con el campo δ en el efecto Kondo $SU(4)$ fue discutido en los **Capítulos 6 y 7**. En los sistemas estudiados, la

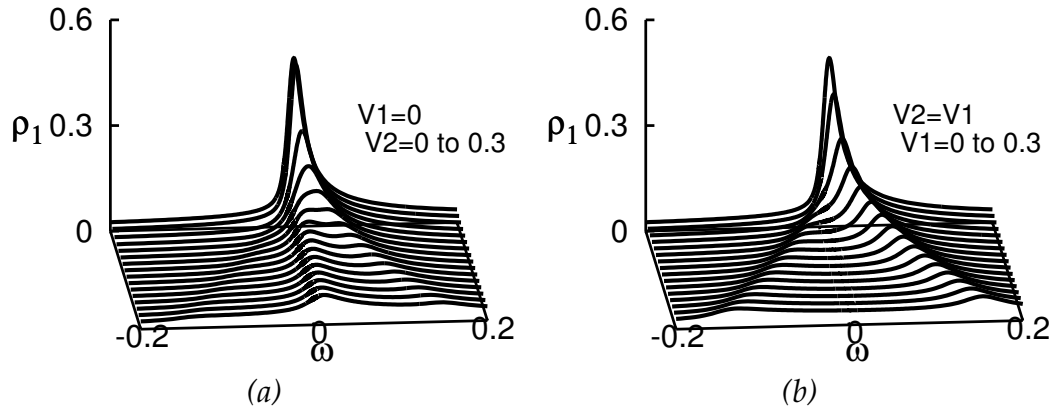


Figura 9.12: Evolución de la densidad de estados de QD1 (con los mismos parámetros que la Fig. 9.7) (a) para $V_1 = 0$ y (b) para $V_1 = V_2$, con V_2 cambiando de 0 a 0.3.

simetría $SU(4)$ de dos dobletes degenerados se rompió moviendo una de las energías $E_2 = E_1 + \delta$, dejando la otra fija. Variando δ , el límite $SU(4)$ ($\delta = 0$) y el límite $SU(2)$ de un nivel (para $\delta \rightarrow \infty$) fueron explorados. Se demostró que para valores no tan grandes, $\delta < T_K(SU(4))$, se conservan las características aproximadas del caso $SU(4)$, aunque la simetría ya está rota. Cuando $\delta \sim T_K(SU(4))$, la temperatura de Kondo cae abruptamente ($T_K \rightarrow T_K(SU(2))$ en el límite de δ muy grande), y la resonancia Kondo en la densidad de estados del doblete de menor energía ρ_1 se hace más estrecha. Además, para δ finito, hay picos satélite en las densidades de estados que se originan a partir de las correlaciones. Hay un pico en $\omega = -\delta$ en ρ_1 y un pico en $\omega = +\delta$ en la densidad de estados del doblete con energía E_2 , ρ_2 . Todos estos hechos son muy útiles para entender las propiedades de transporte.

En la Fig. 9.13 las conductancias G_1 y G_2 se muestran como función de (V_1, V_2) cuando se introduce un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ finito. Para el cálculo, $\delta = E_2 - E_1 = 0.5$ y $E_1 = -4$. Esto implica que el orbital en QD1 es el más poblado a bajas temperaturas. Como sería de esperar, las conductancias en cada punto son muy diferentes. Hay varios puntos para destacar:

(i) Dado que G_1 corresponde al punto con la energía más baja, aún existe una contribución del efecto Kondo $SU(2)$. Este es el origen del aumento de la conductancia en $V_1 = 0$, independientemente de V_2 . El valor máximo de G_1 se produce para $V_1 = 0$, cuando $V_2 = 2\delta$. Por el contrario, G_2 es extremadamente pequeña cerca del equilibrio. Más precisamente, es casi cero en la región con $|V_1|, |V_2| < 2\delta$. Se puede observar que tan pronto como $V_1 > 2\delta$, hay un pico de conductancia a voltaje cero ($V_2 = 0$) en G_2 .

(ii) Otra característica que es clara en la Fig. 9.13 es el aumento de la conductancia a lo largo de las líneas de $eV_1 = \pm eV_2 \pm 2\delta$. En G_1 , este incremento se produce mientras que $|V_1|, |V_2| < 2\delta$. Por el contrario, en G_2 esto sucede fuera de esta región. El origen de esta mejora se puede entender a partir del inicio de eventos de co-tunneling cerca de estas igualdades.

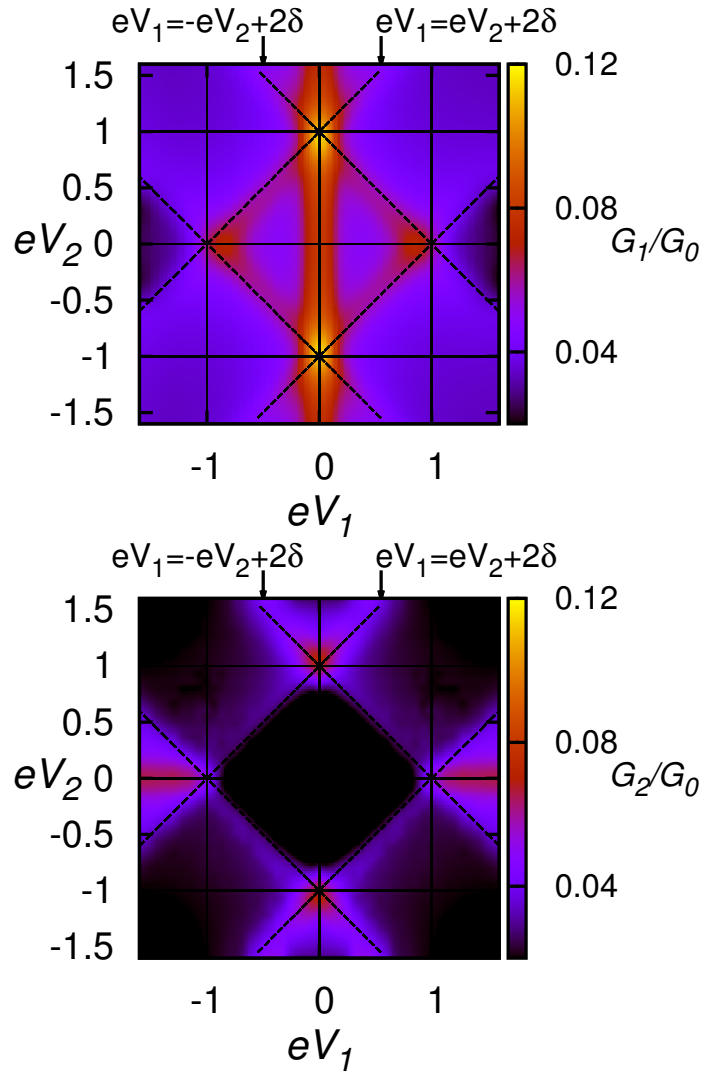


Figura 9.13: Conductancia diferencial de (a) QD1 y (b) QD2 en función de V_1 y V_2 para $\delta = E_2 - E_1 = 0.5$, $E_1 = -4$ y $T = 0.001$. Las líneas gruesas corresponden con $eV_1 = \pm eV_2 \pm 2\delta$ y las líneas finas con $V_i = \pm 2\delta$. De acuerdo con nuestra convención, E_1 es inferior a E_2 y por lo tanto, excepto para $\delta = 0$, está más poblado a bajas temperaturas. La conductancia de QD1 dI_1/dV_1 , exhibe un pico a voltaje cero ($V_1 = 0$), independientemente de V_2 . El aumento de la conductancia se pierde para $V_1 \neq 0$. Existen dos puntos donde la conductancia alcanza los valores máximos que corresponden a $V_1 = 0$ y $V_2 = 2\delta$. Este último incremento es un efecto inelástico de no equilibrio (ver el texto). La corriente a través de QD1 también incrementa en las líneas de $eV_1 = \pm eV_2 \pm 2\delta$, cuando $|V_1|, |V_2| < 2\delta$. Por el contrario, no hay ninguna corriente a través de QD2 (dI_2/dV_2 es casi cero) hasta $|V_1|, |V_2| \geq 2\delta$. Para $V_1 > 2\delta$, hay un pico de conductancia a voltaje cero en $V_2 = 0$ y la conductancia G_2 también incrementa en $eV_1 = \pm eV_2 \pm 2\delta$.

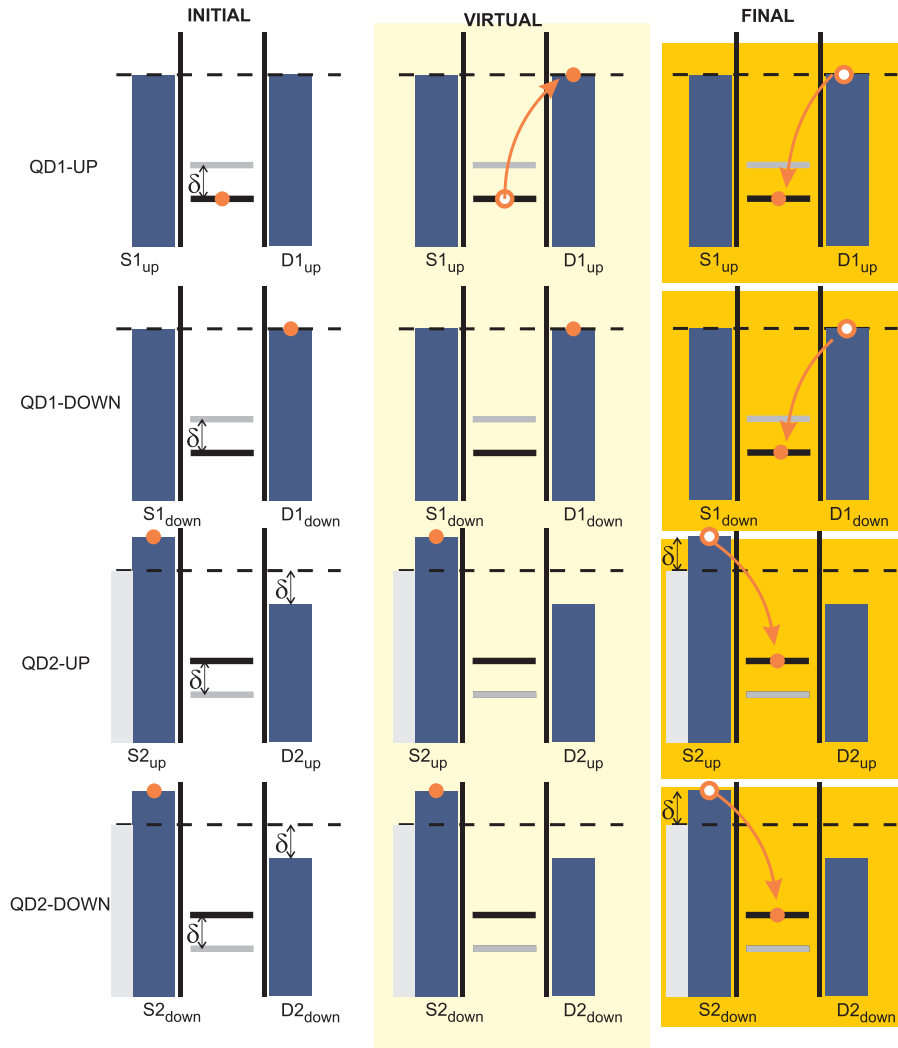


Figura 9.14: Representación de los procesos virtuales cuando hay un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ . Los cables conectados a QD1 están en equilibrio, mientras que un voltaje $V_2 = 2\delta$ se aplica en los cables conectados a QD2. De acuerdo con nuestra convención, E_1 está por debajo de E_2 y por lo tanto, la probabilidad de ocupar QD1 es mucho más alta que QD2 a bajas temperaturas. En el estado inicial, un electrón con espín hacia arriba ocupa el nivel localizada en QD1. En un proceso virtual, el electrón salta a los cables de conducción QD1-up. El QD1 puede ser ocupado nuevamente, por un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo. Estos procesos son los responsables del efecto Kondo SU(2) y originan el pico en G_1 para $V_1 = 0$, independientemente de V_2 (véase la Fig. 9.13). Para voltajes arbitrarios $V_2 < 2\delta$, no hay transporte a través de QD2. Cuando $V_2 = 2\delta$, hay procesos inelásticos que involucran al nivel de energía en QD2. La energía suministrada al electrón en el estado inicial en QD1 para saltar a la banda de conducción puede ser restaurada por un electrón que entra en QD2. Esto conduce a un incremento de ambas conductancias. Las propiedades de transporte están determinadas por las correlaciones entre QD1 y QD2.

El punto de partida es $V_1 = V_2 = 0$. El evento *co-tunneling* en el que el electrón que ocupa QD1 salta a su fuente (S1) o su sumidero (D1) y un electrón de S2 o D2 salta a QD2 está prohibido debido al costo de energía δ . Sin embargo, como se muestra en la Fig. 9.14, cuando $e|V_2|$ alcanza 2δ , un evento de este tipo pasa a ser posible, en el que como resultado hay un flujo neto de un electrón de S2 a D2 o al contrario en función del signo de V_2 , y otro electrón pasa de QD1 a QD2 con una posible inversión de espín. En un segundo evento el electrón de QD2 salta a su banda de menos energía y un electrón de S1 o D1 salta a QD1, dejando a los puntos cuánticos en la misma configuración de carga que al principio. Esto se traduce en un aumento del flujo de corriente I_2 y por lo tanto a un pico en la conductancia G_2 . En promedio $I_1 = 0$. Sin embargo, un pequeño $|V_1|$ rompe la simetría entre S1 y D1 en los eventos anteriores y conduce a una gran G_1 también.

Mientras $|V_1|, |V_2| < 2\delta$, no hay transporte a través de QD2. Las líneas de $eV_1 = \pm eV_2 \pm 2\delta$ son las condiciones particulares del incremento de la conductancia porque a partir de ahí hay más procesos virtuales disponibles. La contribución del transporte a través de QD2, aumenta la corriente a través QD1.

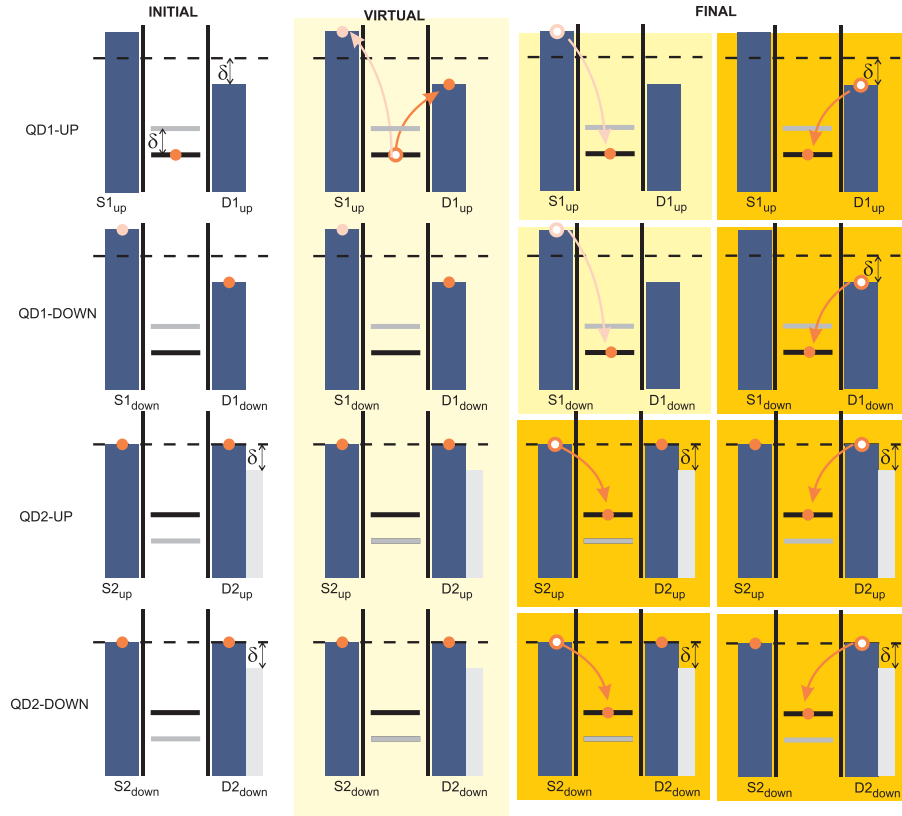


Figura 9.15: Representación de los procesos virtuales posibles en el caso de $V_2 = 0$ y $V_1 = 2\delta$. En este caso, es posible tener un pico a voltaje cero en G_2 causada por el efecto Kondo $SU(2)$.

El pico de voltaje cero en G_2 se puede entender con un razonamiento

similar para V_1 no nulo. En contraste con G_1 , hay un umbral. Aparecerá este aporte para $V_2 = 0$ tan pronto como $V_1 > 2\delta$. Esto se ilustra en la Fig. 9.15. La energía suministrada al electrón en QD1 para saltar a su cable sumidero se compensa con un electrón de S2 o D2 que salta introduciéndose en QD2. La ocurrencia de estos procesos con una posible inversión de espín da lugar al efecto Kondo SU(2) y así al pico a voltaje cero en G_2 .

(iii) La escala de energía de la variación de G_1 con V_1 está de nuevo dada por la temperatura de Kondo T_K , pero esta es más pequeña que en el caso SU(4). Como se presenta en los **Capítulos 6 y 7**, la energía de enlace del estado fundamental singlete obtenida a partir de un cálculo variacional simple puede ser descrita por la expresión

$$\frac{T_K(\delta)}{T_K(0)} = \sqrt{1 + \tilde{\delta}/d + \tilde{\delta}^2} - \tilde{\delta},$$

$$\tilde{\delta} = \frac{\delta}{2T_K(0)}, \quad d = \frac{D}{2T_K(0)},$$

donde $T_K(0) = T_K^{SU(4)}$ y D es la mitad del ancho de banda. El ancho del pico de Kondo calculado con la NCA está de acuerdo notablemente bien con esta expresión. Como se puede observar en la Fig. 9.13, para $T < T_K(\delta)$ y $V_1 > T_K(\delta)$, $G_1(V_1)$ para $V_2 = 0$ presenta una estructura con tres picos que no se ha observado experimentalmente todavía y es característico de la transición suave SU(4) \rightarrow SU(2). Dado que $T_K(\delta)$ varía en varios órdenes de magnitud, una observación experimental de esta huella digital de la transición suave está cerca de las posibilidades experimentales en la actualidad.

La evolución de los mapas con δ se muestra en la Fig. 9.16. Pueden ser interpretados con las ideas discutidas para $\delta = 0.5$. Se puede observar que para $\delta = 0.01$ (Figs. 9.16(c) y (d)), que es ligeramente inferior a $T_K(SU(4)) = 0.012$, el sistema se comporta como en el límite del SU(4).

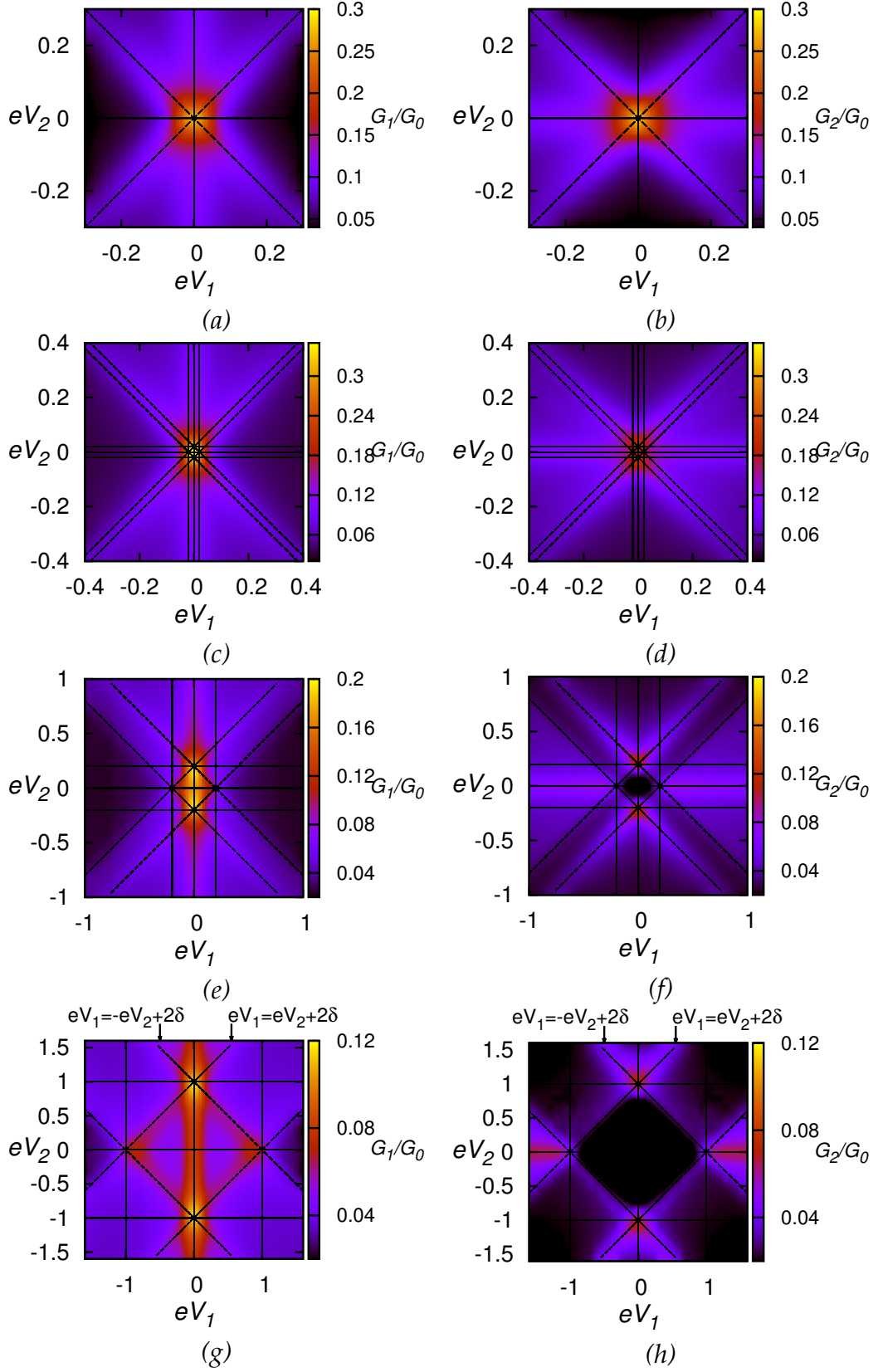


Figura 9.16: Conductancia diferencial de (a)(c)(e)(g) QD1 y (b)(d)(f)(h) QD2 como función de V_1 y V_2 para (a)(b) $\delta = 0$, $T = 5 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(SU(4)) = 0.012$) (c)(d) $\delta = 0.01$, $T = 5 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(0.01) = 8 \cdot 10^{-3}$) (e)(f) $\delta = 0.1$, $T = 1 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(0.1) = 3 \cdot 10^{-3}$) y (g)(h) $\delta = 0.5$, $T = 1 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(0.5) = 3 \cdot 10^{-4}$). En todos los cálculos $E_1 = -4$.

9.3. La densidad de estados fuera de equilibrio

Más información sobre la estructura de la conductancia de no equilibrio se obtiene de las densidades de estados $\rho_i(\omega)$ correspondientes a los niveles localizados $|i\sigma\rangle$ en el QDi.

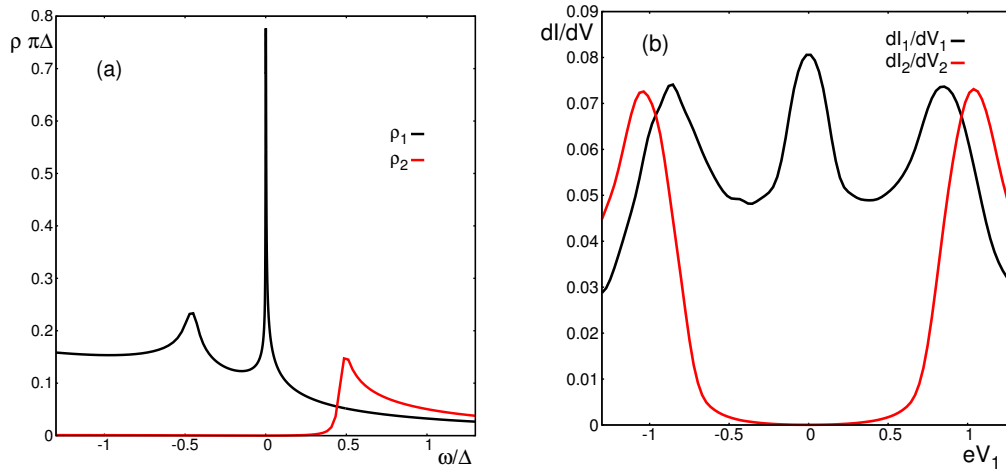


Figura 9.17: (a) Densidades de estado para ambos QDs. (b) G_i en función del voltaje V_i manteniendo la otra tensión a cero. Parámetros como en la Fig. 9.13: $E_1 = -4$, $\delta = 0.5$.

Como se puede ver en la Fig. 9.17(a), en equilibrio y a bajas temperaturas, $\rho_1(\omega)$ tiene un pico Kondo en la energía de Fermi (que se toma como el origen de las energías) de ancho $\sim T_K(\delta)$ y un pico cerca de $-\delta$, mientras que $\rho_2(\omega)$ sólo tiene un pico inelástico cerca de δ . El ancho de ambos picos inelásticos es del orden de $T_K^{SU(4)}$ para pequeño δ (pero $\delta > T_K^{SU(4)}$ de manera que los picos inelásticos se distinguen del pico Kondo) y aumenta con el aumento de δ . Este comportamiento es una reminiscencia de la evolución de los picos del Kondo SU(2) ordinario bajo un campo magnético aplicado.

Estas densidades de los estados tienen que compararse con las conductancias mostradas en la Fig. 9.17(b). Estas son $G_1(V_1)$ a $V_2 = 0$ y viceversa. Como se explicó, **esta configuración de voltajes no permite medir directamente la densidad de estados de equilibrio**. Las densidades de estado de equilibrio pueden ser investigadas en la **espectroscopía orbital** controlando los parámetros de modo que la configuración sea similar a la usada en la espectroscopía de efecto túnel (STS).

Específicamente si $\Gamma_{Si} \gg \Gamma_{Di}$, y sólo el potencial en uno de los cables V_{Di} se desplaza del nivel de Fermi, los puntos están en equilibrio con la fuente y para $T \ll T_K(\delta)$, $G_i \propto \rho_i(eV_i)$. Nuestros cálculos muestran que una proporción $\Gamma_{Si}/\Gamma_{Di} = 9$ es suficiente para llegar a este régimen STS (ver Sec. 9.4).

Esta propiedad fue utilizada para estudiar la densidad espectral de equilibrio y compararla con la que resulta del grupo renormalización numérica (NRG) calculada para un caso en el que los términos de los efectos Zeeman

y pseudo-Zeeman estaban presentes. Sin embargo, esto destruye el efecto Kondo y la estructura de dos picos como la mostrado en la Fig. 9.17(a) permanece inexplorado. Debido a las limitaciones de resolución del NRG a energías finitas nuestros resultados con NCA son un complemento útil en el equilibrio y tienen la ventaja de que se pueden extender a la situación de no equilibrio.

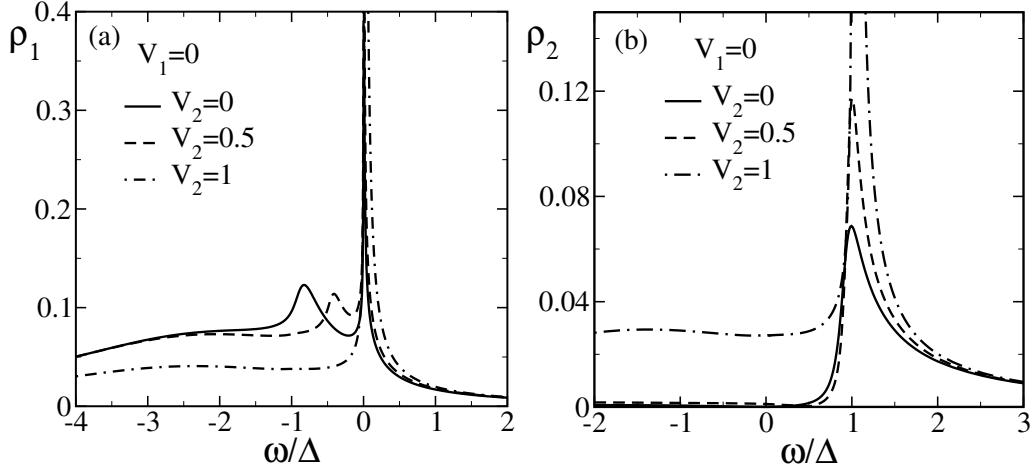


Figura 9.18: Densidad de estados de (a) QD1 y (b) QD2 en función de la frecuencia para $E_1 = -3$, $\delta = 1$ y varios voltajes entre la fuente y el sumidero 2.

En general las densidades espectrales cambian bajo la aplicación de voltajes V_i . El caso de una caída de tensión simétrica no es la excepción. Suponiendo como una primera aproximación cruda que $\rho_i(\omega)$ están fijas, sería de esperar que $G_1(V_1)$ tenga un pico en $V_1 = 0$ correspondiente al pico de Kondo en $\rho_1(\omega)$ y dos picos a $V_1 = \pm 2\delta/e$ correspondientes a los picos inelásticos de $\rho_1(\omega)$. Esto es, de hecho, lo que ocurre para $V_2 = 0$ [ver Fig. 9.17(b)], pero no para $V_2 \neq 0$ [ver Fig. 9.13(a)]. Del mismo modo, sería de esperar sólo picos inelásticos en $V_2 = \pm 2\delta/e$ en $G_2(V_2)$, como ocurre para $V_1 = 0$ pero no para $V_1 \neq 0$.

Las diferencias con el comportamiento esperado para bandas rígidas cuando ambos $V_i \neq 0$ se deben a cambios en el peso espectral con respecto a la situación de equilibrio. Para ilustrar estos cambios consideramos la situación de no equilibrio representada en la Fig. 4(d) de Amasha et al. [2013]. En este caso, el acoplamiento a la fuente es más grande y los voltajes se aplican sólo en una de las fuentes V_{Si} , manteniendo las otras tres tensiones en cero. Específicamente $\Gamma_i = 1$, pero usamos $\Gamma_{S1}/\Gamma_{D1} = 3$ y $\Gamma_{S2}/\Gamma_{D2} = 12$, tal como se describe en el material suplementario de Amasha et al. [2013]. Además, $E_1 = -3$ y $\delta = 1$ fueron elegidos para corresponder aproximadamente a los parámetros experimentales. La evolución de $\rho_1(\omega)$ con V_{S2} se muestra en la Fig. 9.18(a).

En el equilibrio ($V_{S2} = 0$), la densidad espectral de QD1 tiene los dos picos mencionados anteriormente. El pico inelástico se puede entender como una mezcla del estado fundamental para acoplamiento cero con un estado

excitado en el que el electrón en QD1 se desplaza a QD2 y un electrón de S2 se desplaza a D1. Ambos estados están conectados a segundo orden en el acoplamiento cables-puntos cuánticos. La energía de excitación es δ y esta mezcla permite que la creación de un agujero en QD1 con la energía δ tenga una probabilidad finita, que conduce a un pico en $-\delta$ en $\rho_1(\omega)$. Cuando aumenta el potencial químico en S2, la energía de excitación disminuye y el pico se desplaza hacia la energía de Fermi. Cuando este potencial alcanza δ , el pico inelástico se fusiona con el elástico y esto lleva a un pico en $G_1(V_1)$ para $V_1 = 0$, incluso a temperaturas por encima de $T_K(\delta)$ para el que desaparece el pico elástico inicial. Esto está de acuerdo con el resultado presentado en la Fig. 4 (d) de Amasha et al. [2013]. Se obtiene un acuerdo cualitativo con el experimento, pero la relación de intensidades es más grande en nuestro caso. Esto podría ser debido incertidumbres en la relación de E_1/Γ_i o a fluctuaciones de δ introducidas por efectos de decoherencia ⁸.

Un razonamiento similar al anterior puede ser usado para una caída de tensión simétrica y trae una explicación alternativa del aumento en la intensidad a lo largo de las líneas de $eV_1 = \pm eV_2 \pm 2\delta$ mostrado en la Fig. 9.13.

En la Fig. 9.18(b) se muestra como $\rho_2(\omega)$ cambia con V_{S2} . En contraste con $\rho_1(\omega)$, gran parte del peso espectral se encuentra por encima de la energía de Fermi. Por lo tanto su magnitud es proporcional a la cantidad de la configuración singlete sin partículas en el estado fundamental, o en otras palabras, con el grado de valencia intermedia. Observamos que $\rho_2(\omega)$ aumenta a medida que V_{S2} se acerca a δ .

9.4. La configuración STS

En esta sección se analizan brevemente los resultados de la configuración STS. Hemos mantenido $\Gamma_i = 1$, pero estableciendo $\Gamma_{S_i} = 0.1$ y $\Gamma_{D_i} = 0.9$. Con la convención de la Fig. 9.6(b) para la aplicación del voltaje, todas las caídas de tensión ocurren en el cable de la fuente mientras que el sumidero se mantiene en equilibrio. La evolución de los mapas de conductancia $G_i(V_1, V_2)$ se muestran en la Fig. 9.19 para diferentes valores de δ .

Los resultados son muy diferentes de lo que se muestra en la Fig. 9.16 para una caída de tensión y un acoplamiento fuente-sumidero simétricos. El primer comentario importante es que la conductancia $G_i(V_i)$ es sólo ligeramente afectada por el otro voltaje. Esto está más en acuerdo con la idea de la espectroscopía. En el límite SU(4) (Figs. 9.16(a) y (b)) y para $\delta = 0.01 < T_K(SU(4))$ (Fig. 9.16(c) y (d)), G_1 (G_2) muestra sólo un pico de cerca de $V_1 = 0$ ($V_2 = 0$), desplazado a la derecha, como corresponde a la densidad de estados en el límite de SU(4). Para $\delta = 0.1$ y $\delta = 0.5$ la conductancia refleja la ruptura de la simetría. Como se puede observar en la Fig. 9.16(e) y (g), la conductancia G_1 muestra dos picos. El pico a $V_1 = 0$ es debido al efecto Kondo SU(2) producido por la degeneración de espín restante. El otro pico

⁸Amasha, comunicación privada.

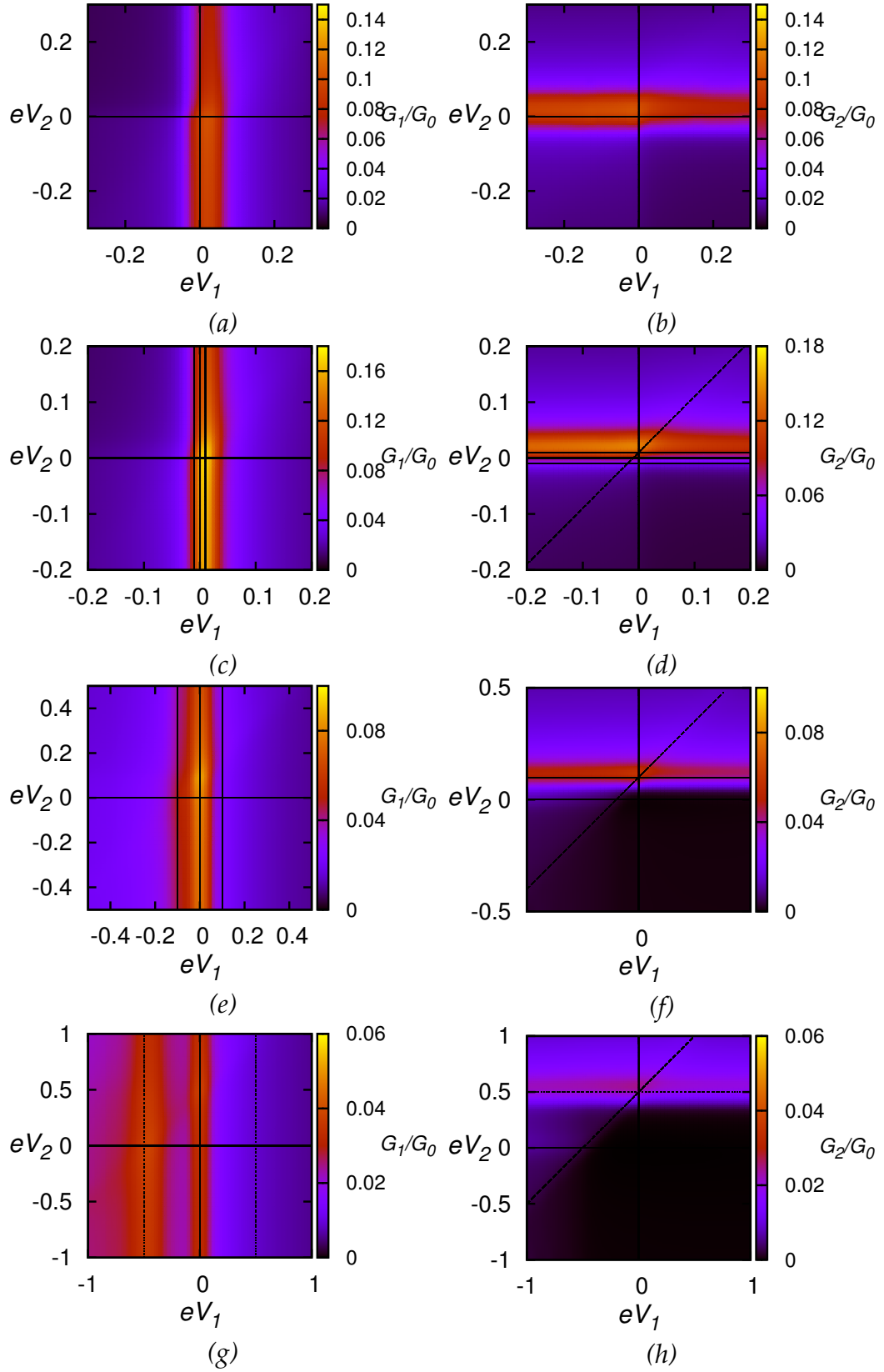


Figura 9.19: Conductancia diferencial de (a)(c)(e)(g) QD1 y (b)(d)(f)(h) QD2 como función de V_1 y V_2 in la configuración STS para (a)(b) $\delta = 0$, $T = 5 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(SU(4)) = 0.012$) (c)(d) $\delta = 0.01$, $T = 5 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(0.01) = 8 \cdot 10^{-3}$) (e)(f) $\delta = 0.1$, $T = 1 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(0.1) = 3 \cdot 10^{-3}$) y (g)(h) $\delta = 0.5$, $T = 1 \cdot 10^{-3}$ ($T_K(0.5) = 3 \cdot 10^{-4}$). En todos los casos $E_1 = -4$, $\Gamma_{Si} = 0.1$ y $\Gamma_{Di} = 0.9$.

a $V_1 = -\delta$ es el pico satélite producido por las correlaciones orbitales. No hay pico a bias positivo. Estos resultados son como las que se presentan en el experimento [Amasha et al., 2013]. A su vez, G_2 muestra sólo un pico en $V_2 = +\delta$ (véase la Figs. 9.16(f) y (h)).

Algunos cortes de los mapas de conductancia se presentan en la Fig. 9.20. Se puede observar claramente cómo esta configuración STS da conductancias diferenciales que imitan las densidades de estados. La evolución con δ puede ser seguida muy claramente: cuando se pierde la simetría SU(4), la resonancia Kondo se hace más estrecha y se desplaza a voltaje cero. Un pico en $V_1 = -\delta$ ($V_2 = +\delta$) aparece en G_1 (G_2).

9.5. Algunas conclusiones

En resumen, hemos calculado las propiedades de transporte de un sistema de dos puntos cuánticos utilizando el formalismo Keldysh y la NCA. Predecimos los valores de la conductancia a través de cualquiera de los dos puntos cuánticos acoplados capacitivamente en función de la tensión aplicada en cualquiera de ellos. Creemos que nuestros resultados son importantes para estimular la investigación experimental en la línea de las mediciones recientes de transporte resuelto en pseudo-espín [Amasha et al., 2013] [Keller et al., 2014]. En particular, la presencia de tres picos en $G_1(V_1)$ para $V_2 = 0$ (o dos picos en una configuración STS) con uno de ellos en $V_1 = 0$ es característica de la transición suave SU(4) \rightarrow SU(2). Esto no ha sido observado en el experimento todavía. Sin embargo, dadas las grandes posibilidades experimentales de ajuste de los parámetros y la especial sensibilidad de $T_K(\delta)$ con el desdoblamiento pseudo-Zeeman δ creemos que se puede observar en un futuro próximo en este sistema.

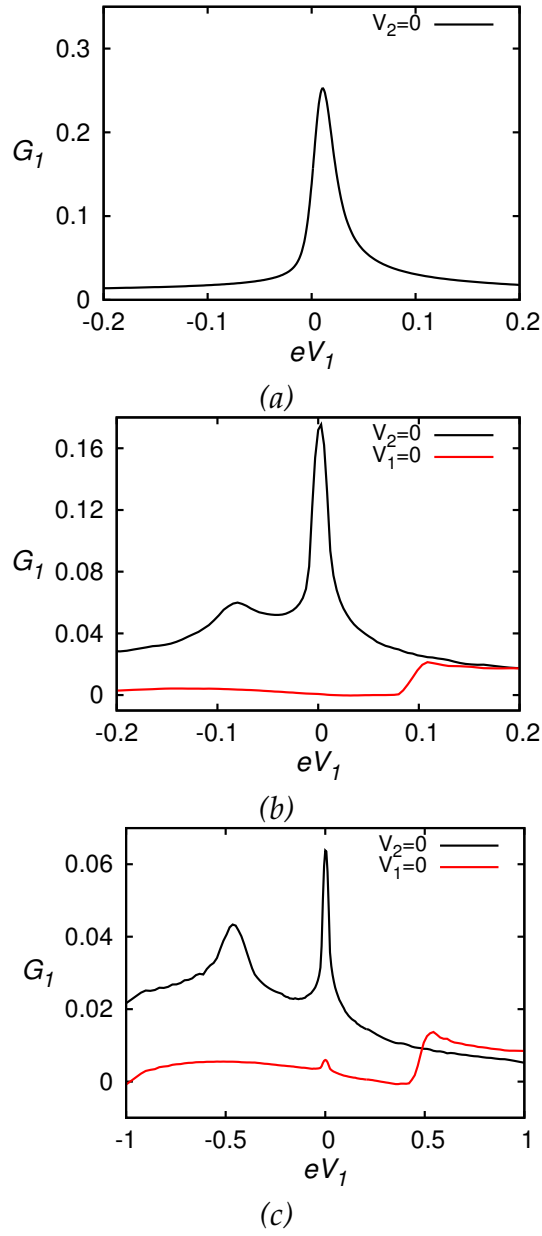


Figura 9.20: Cortes tomados de los mapas de conductancia de la Fig. 9.19.

Restauración de la simetría SU(4) en un sistema de dos puntos cuánticos

- 10.1 De SU(4) a SU(2) por medio de un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ .
- 10.2 El desdoblamiento efectivo: la pérdida de simetría.
- 10.3 Restauración de simetría.
- 10.4 Conclusiones.

Este capítulo puede considerarse un complemento del **Capítulo 9**. El problema objeto de estudio es el transporte a través de un sistema de dos puntos cuánticos. El sistema está construido en una heteroestructura semiconductor utilizando compuertas electrostáticas. Esto es muy ventajoso puesto que es posible tener un gran control en los parámetros del sistema. En particular, los puntos cuánticos están acoplados capacitivamente, son mutuamente interactuantes, y están conectados cada uno a su propio par de cables de fuente y sumidero. Las ocupaciones de los puntos se pueden variar mediante tensiones de compuerta. El confinamiento en los puntos es tal que la energía de carga es bastante grande y cuando hay un número impar de electrones es posible tener efecto Kondo debido a la degeneración de espín. Por otra parte, el hecho de que los puntos son interactuantes hace que no sea posible cambiar las ocupaciones de forma independiente. En el mapa de estabilidad de ocupaciones (N_1, N_2) como función de las tensiones de compuerta V_{g1} y V_{g2} , hay líneas de coexistencia donde la adición de un electrón extra en cualquiera de los dos puntos es equivalente. Tal como se presentó en el **último Capítulo**, este trabajo está enfocado cerca del punto de coexistencia donde dos estados con un número total impar de electrones se vuelven degenerados, por ejemplo $(1, 0) \leftrightarrow (0, 1)$. El índice orbital puede ser considerado como un pseudo-espín. La degeneración completa de espín más pseudo-espín conduce a un efecto Kondo más fuerte, el efecto Kondo SU(4).

Este sistema fue propuesto como una herramienta experimental para estudiar la estructura de la función de onda del estado Kondo. Dado que el

transporte a través de cada punto puede ser controlado de forma independiente, con respecto al estado Kondo, estos son directamente sondas resueltas en pseudo-espín. Idealmente, esto permitiría una espectroscopía directa de las densidades espectrales, cuyas contribuciones se puede medir en función del desdoblamiento pseudo-Zeeman que rompe la simetría SU(4). Sin embargo, como se ha demostrado en el último capítulo, las densidades de estado de equilibrio son modificadas por los voltajes aplicados de una manera compleja. En consecuencia, las conductancias G_1 y G_2 muestran un escenario interesante debido a los efectos de correlación en función de los voltajes V_1 y V_2 .

En general, uno de los problemas para la realización experimental del efecto Kondo SU(4) es que los acoplamientos deben satisfacer $\Gamma_{S1} + \Gamma_{D1} = \Gamma_{S2} + \Gamma_{D2}$, de lo contrario la simetría SU(4) se pierde. En este capítulo se analizan los efectos de un acoplamiento asimétrico de los dos pseudo-espines y se muestra cómo con la sintonización apropiada del desdoblamiento pseudo-Zeeman y un cuidadoso control de la temperatura, es posible restaurar una **simetría SU(4) efectiva**.

10.1. De SU(4) a SU(2) por medio de un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ

Los parámetros relevantes de nuestro modelo para este sistema se muestran en la Fig. 10.1. Los siguientes resultados corresponden al caso de equilibrio, i.e. $\mu_{Si} = \mu_{Di} = \epsilon_F = 0$, fijando el nivel de Fermi a cero. La hibridación total de un punto se toma como la unidad de energía $\Gamma_i = \Gamma_{Si} + \Gamma_{Di} = 1$. Como se muestra en la Fig. 10.1(b), el modelo describe el sistema cerca del punto de degeneración donde $E_1 = E_2$. Es posible controlar la energía relativa de los niveles con tensiones electrostáticas. Esto es como un campo pseudomagnético que genera un desdoblamiento pseudo-Zeeman $\delta = E_2 - E_1$, tomado como positivo en la figura.

La densidad de estados ρ_i se muestra en la Fig. 10.2 en la condición de plena simetría SU(4). Los parámetros correspondientes son $E_1 = E_2 = -4$ y $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$. Como consecuencia del aumento de la degeneración, el efecto Kondo es más fuerte que para el caso habitual SU(2). La resonancia Kondo, cerca del nivel de Fermi, es más ancha. La temperatura de Kondo se puede extraer del ancho mitad a la mitad del máximo del pico, $T_K(SU(4)) = 0.012$. El pico se desplaza respecto del nivel de Fermi (en comparación con el caso SU(2) donde tiende a estar centrado en cero) una cierta cantidad consistente con la regla suma de Friedel, es decir, con el fin de satisfacer la condición del valor de la densidad de estados en el nivel de Fermi a temperatura cero (véase la discusión en el **Capítulo 6**). La degeneración orbital se puede romper con un desdoblamiento pseudo-Zeeman δ . Tomando $E_1 = -4$ y $E_2 = E_1 + \delta$, es posible explorar diferentes regímenes según el valor de δ , desde $\delta = 0$ que corresponde al caso SU(4) a $\delta \rightarrow \infty$ donde el hay simetría SU(2) con un sólo nivel. Esta transición suave se discutió en el **Capítulo 6** en el contexto de

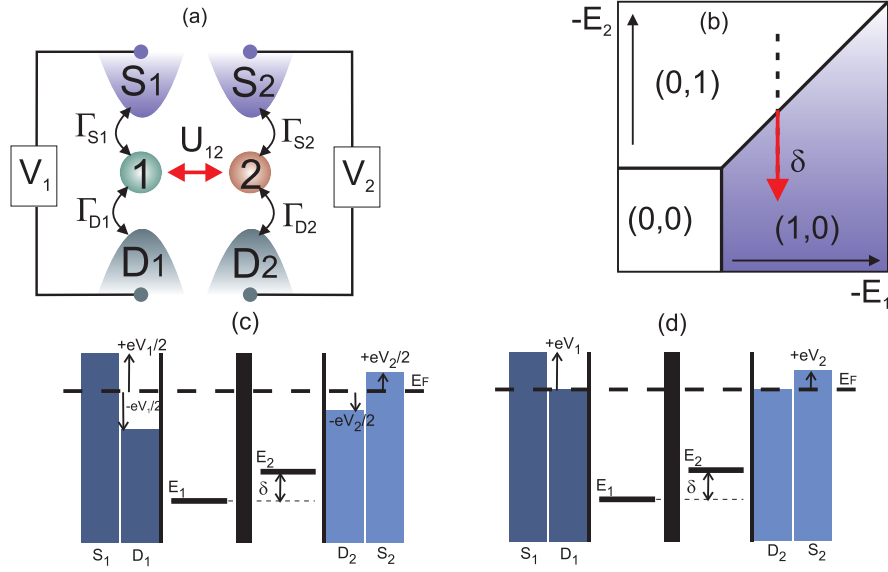


Figura 10.1: (a) Esquema de la configuración experimental. Hay dos puntos cuánticos QD1 y QD2, que están conectados cada uno a una fuente (S1, S2) y a un sumidero (D1, D2) por separado. Hay una repulsión de Coulomb entre ellos U_{12} que consideramos muy grande. (b) Diagrama de ocupaciones estables (N_1, N_2) en función de las energías de los niveles localizados en QD1 y QD2. Estas energías se pueden controlar con tensiones de compuerta. Sintonizando los parámetros apropiadamente se puede estar en una línea de la coexistencia (comienzo de la flecha roja), donde dos configuraciones con el mismo número total de electrones son equivalentes. Trabajamos con un número total de electrones impar para estar en el régimen de Kondo. La flecha roja marcada con $\delta = E_2 - E_1$ indica nuestra convención para la ruptura de la simetría. En (c) y (d) se muestra nuestra convención para la aplicación de voltajes, utilizada para estudiar las propiedades de transporte.

nuestro modelo de interferencia que se reduce a un modelo de Anderson SU(4) con un campo de ruptura de simetría en el caso de $\phi = \pi$. Mientras la separación δ es menor que $T_K(SU(4))$, el sistema se comporta como en el límite SU(4). Tan pronto como $\delta \sim T_K(SU(4))$, la temperatura de Kondo comienza a bajar bruscamente y las densidades de estados pasan a ser muy diferentes para cada uno de los pseudo-espines.

La evolución de T_K con δ se muestra en la Fig. 10.3(a). La variación es de varios órdenes de magnitud, desde $T_K(SU(4)) = 0.012$ a un valor mucho más bajo, $T_K(SU(2)) \sim 5 \cdot 10^{-4}$. Esta transición suave está acompañada con un cambio en las ocupaciones, de $n_1 = n_2 \approx 0.5$ en el límite SU(4) a $n_1 \approx 1$ y $n_2 \approx 0$ para δ muy grande. En lugar de las ocupaciones, se muestran en la Fig. 10.3 (b) las conductancias de equilibrio G_i (calculadas en respuesta lineal). Para δ muy grande, $G_1 \rightarrow 2e^2/h$, mientras que $G_2 \rightarrow 0$. A medida que $\delta \sim 0.01 \approx T_K(SU(4))$, ambas conductancias se vuelven casi iguales $G_1 = G_2 = 0.35$. Este valor es una consecuencia de la violación de la regla de suma de Friedel en la aproximación *non-crossing* (NCA). Se puede demostrar que dentro de la NCA la densidad de estados a $T = 0$ evaluada en el nivel de

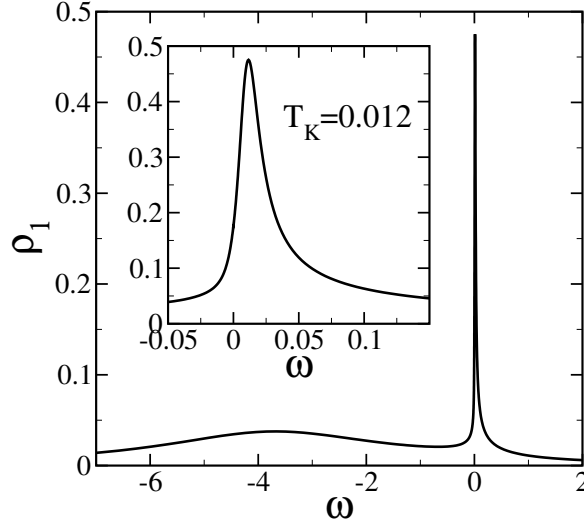


Figura 10.2: Densidad de estados del nivel localizado en QD1 a bajas temperaturas en el caso de simetría SU(4). Corresponde al estado $|1\sigma\rangle$. La energía del nivel localizado es $E_1 = -4$ y $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$. Además del pico de transferencia de carga ubicado en $\omega = E_1$, existe una resonancia Kondo ancha cerca de $\omega = 0$. Un zoom a las energías cercanas al nivel de Fermi, $E_F = 0$, se presenta en el recuadro interior. El máximo de la resonancia Kondo se desplaza hacia la derecha del nivel de Fermi de acuerdo con la regla de suma de Friedel.

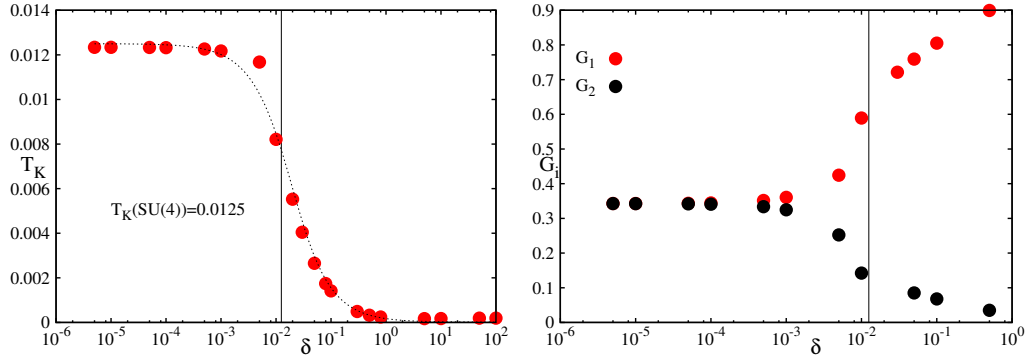


Figura 10.3: Evolución de (a) la temperatura de Kondo T_K y (b) las conductancias G_i con el desdoblamiento pseudo-Zeeman δ .

Fermi es

$$\rho_m^{NCA}(0) = \frac{\pi^2}{(1+N)^2} \frac{1}{\pi\Delta},$$

lo que da $\rho_m^{NCA(2)}(0) = \frac{\pi^2}{9} \rho^{F(2)}$ para el caso SU(2) y $\rho_m^{NCA(4)}(0) = \frac{2\pi^2}{25} \rho^{F(4)}$ para el SU(4), donde $\rho^{F(N)}$ es la densidad de estados que se espera de acuerdo a la regla de suma de Friedel para degeneración N ¹. Esto significa un 9.7 % de sobreestimación en el límite del SU(2) y un 21 % de **subestimación** en el SU(4). El 79 % de $G_0/2$ es de 0.39 que se esperaría a temperatura cero².

¹ Aquí he considerado $\rho^{F(2)} = \frac{1}{\pi\Delta}$ y $\rho^{F(4)} = \frac{1}{2\pi\Delta}$. Ver **Capítulo 6**.

² Agradezco a Pablo Roura-Bas por aclarar este punto para mí.

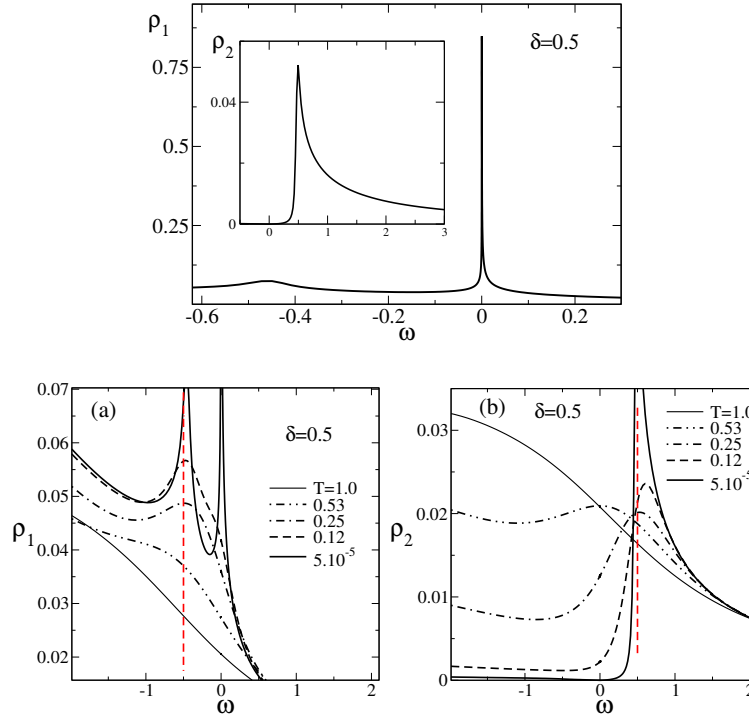


Figura 10.4: Densidad de estados del nivel localizado $|i\sigma\rangle$ correspondiente a QD1 y QD2 para un desdoblamiento pseudo-Zeeman $\delta = 0.5$ a $T = 5.10^{-5}$ (panel superior) y para varias temperaturas (a), (b). Parámetros: $E_1 = -4$, $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$, $D = 10$. A temperaturas muy bajas ($T < T_K(SU(2))$) hay una resonancia Kondo estrecha en ρ_1 y también un pico satélite en $\omega \sim -\delta$. En ρ_2 sólo hay un pico satélite en $\omega \sim +\delta$. Los picos satélite son causados por correlaciones orbitales y se desarrollan a temperaturas más altas, $T \sim 10T_K(SU(4))$.

En la transición suave $SU(4) \rightarrow SU(2)$, existe un régimen muy interesante para $\delta > T_K(SU(4))$ pero no tan grande. En la Fig. 10.4 las densidades de estados se muestran para $\delta = 0.5$. Este es el valor del desdoblamiento pseudo-Zeeman que se consideró en el último capítulo para analizar las propiedades de transporte. En comparación con el resultado presentado en la Fig. 10.2, se puede observar que la densidad de estados ρ_1 para el doblete con la energía fija $E_1 = -4$ (pseudo-espín $i = 1$) calculada a temperaturas muy bajas (Fig. 10.4(a)) muestra un pico Kondo mucho más estrecho, más centrado en cero, que corresponde al efecto Kondo $SU(2)$. También hay un pico satélite, un pico de energía finita en $\omega \sim -0.5 = -\delta$. Este pico tiene un ancho $\sim T_K(SU(4))$ y es también consecuencia de las correlaciones. La densidad de estados para el otro pseudo-espín, ρ_2 (recuadro interior en la Fig. 10.4(a)) no muestra ninguna otra estructura que un pico en $\omega \sim +0.5 = +\delta$. La dependencia de los picos de satélite con la temperatura es diferente que la de la resonancia Kondo $SU(2)$. En la Fig. 10.4(b) y (c) se presenta la evolución de las densidades de estados con temperatura. Los picos satélite se desarrollan a mayor temperatura. Se producen por correlaciones relacionados con una escala diferente, $T_K(SU(4))$, que es mayor. Hemos observado

un comportamiento similar para diferentes valores de δ , cerca de la transición suave.

10.2. El desdoblamiento efectivo: la pérdida de simetría

La simetría SU(4) es muy sensible a las imperfecciones experimentales. De hecho, si uno de los puntos está más acoplado a los cables que el otro, aún cuando las energías sean las mismas, se pierde la simetría completa y el sistema sólo muestra efecto Kondo SU(2) a bajas temperaturas. Esto ocurre, como se discute en lo que sigue, porque en el régimen de Kondo, si los puntos no están acoplados igualmente, sus energías se renormalizan diferentemente desde el punto de vista del grupo de renormalización. A medida que desciende la temperatura, el nivel más acoplado domina la física.

Para ilustrar esto, el efecto de un acoplamiento asimétrico en las densidades de estados se muestra en la Fig. 10.5. En este caso, $E_1 = E_2 = -4$ pero $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$. Uno de los acoplamientos se mantiene igual a la unidad $\Gamma_1 = 1$ y Γ_2 toma valores 0.5, 0.7 y 0.9. De acuerdo con estos parámetros, el pseudo-espín $i = 1$ está más acoplado. Las densidades de estados resultantes ρ_1 y ρ_2 son muy similares al caso que se muestra en la Fig. 10.4 para $\delta = 0.5$. Hay picos satélites en $\omega = -\tilde{\delta}$ en ρ_1 y en $\omega = +\tilde{\delta}$ en ρ_2 . En ρ_1 también hay un pico Kondo en el nivel de Fermi que está más cerca de cero de lo que se encuentra en el límite SU(4) a medida que $\Gamma^2 \rightarrow \Gamma^1$.

El efecto de tener diferentes acoplamientos es como un *desdoblamiento efectivo* $\tilde{\delta}$. Este desdoblamiento efectivo es mayor para $\Gamma_1 = 1$, $\Gamma_2 = 0.5$ y se hace más pequeño para $\Gamma_2 = 0.9$. Si las energías renormalizadas son \tilde{E}_i , es posible definir la separación efectiva como $\tilde{E}_2 = \tilde{E}_1 + \tilde{\delta}$. Con estos parámetros, los desdoblamientos efectivos resultantes son 0.13, 0.08 y 0.03 para $\Gamma_2 = 0.5, 0.7$ y 0.9 respectivamente (curvas negras, rojas y verdes en la Fig. 10.6). Estos valores se han obtenido a partir de la posición de los picos satélite en las densidades de estados.

Estos valores de $\tilde{\delta}$ se pueden comparar con un cálculo del grupo de renormalización funcional que generaliza el de Haldane para el caso SU(2). Según Haldane [Haldane, 1978a], el estado localizado puede estar vacío con energía e_0 u ocupado con e_i . La energía $E_d = e_i - e_0$. Todas estas energías corresponden al nivel aislado. Si se toma en cuenta el acoplamiento a la banda, cuando se lleva a cabo la integración sobre los estados de conducción cerca de la parte superior y la parte inferior de la banda, hay una renormalización de estas energías. Esta renormalización es causada por los posibles procesos de destrucción de un electrón en el nivel localizado y su creación en la banda de conducción o viceversa. El **estado vacío** disminuye su energía con términos $\sum_i \frac{2V_i^2}{E_d + D}$, donde V_i es la amplitud de hibridación ($\Delta_i = \Gamma_i/2 = \pi\rho_0 V_i^2$, para una densidad de estados constante ρ_0 para los electrones de conducción), el factor 2 proviene de las contribuciones de espín hacia arriba o abajo y $-D$ es la parte inferior de la banda de conducción. El **estado ocupado**

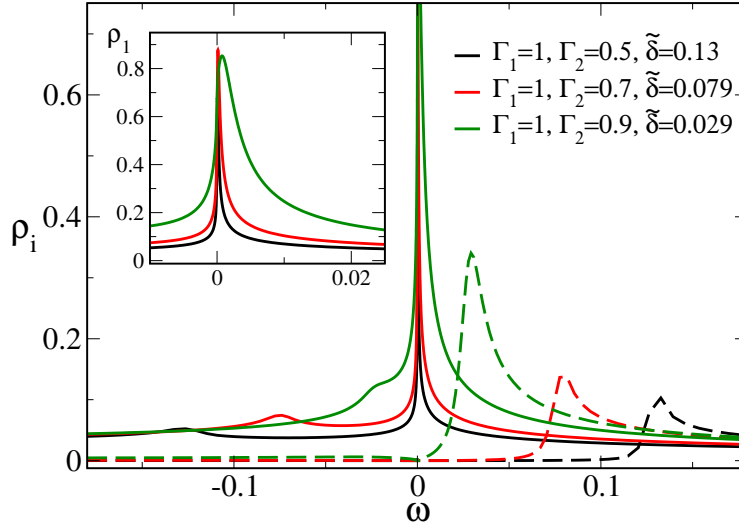


Figura 10.5: Densidades de estados para los niveles localizados $|i\sigma\rangle$ a bajas temperaturas en el punto de degeneración $E_1 = E_2 = -4$ con diferentes hibridaciones: $\Gamma_1 = 1$, $\Gamma_2 = 0.5$ (negro), 0.7 (rojo) y 0.9 (verde). La curva de línea continua (discontinua) corresponde a ρ_1 (ρ_2). Un zoom a $\omega \sim 0$ se presenta en el recuadro interior. El efecto de los acoplamientos desiguales es análogo a la presencia de una separación efectiva $\tilde{\delta}$. Este desdoblamiento es más grande cuando las hibridaciones son más desiguales.

disminuye su energía con un término que va como $\sum_i \frac{V_i^2}{D-E_d}$. Después de la renormalización $\tilde{\delta}$ viene dado por

$$\tilde{\delta} = \frac{1}{2\pi}(\Gamma_2 - \Gamma_1) \ln \left(\frac{\alpha D}{|E_d|} \right), \quad (10.1)$$

donde α es una cantidad del orden de la unidad que tomamos $\alpha = 2$. Los valores de $\tilde{\delta}$ de la Ec. (10.1) se muestran en la Fig. 10.6 (línea azul discontinua). Los puntos negros corresponden a los valores extraídos de la posición de los picos de satélite en las densidades de estados. Se puede observar que el acuerdo es bastante bueno.

10.3. Restauración de la simetría

Cuando se rompe la simetría SU(4) surge la cuestión de si es posible restaurarla nuevamente. Dado un δ finito o diferentes hibridaciones $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$, la simetría se rompe a nivel del Hamiltoniano, por lo tanto a un nivel muy fundamental.

De hecho, a pesar de la simetría SU(4) rota, nuestros resultados sugieren que para una temperatura fija la simetría puede ser restaurada de una manera efectiva. Es necesario aclarar que los parámetros se pueden ajustar para recuperar las características aproximadas de la simetría SU(4) pero,

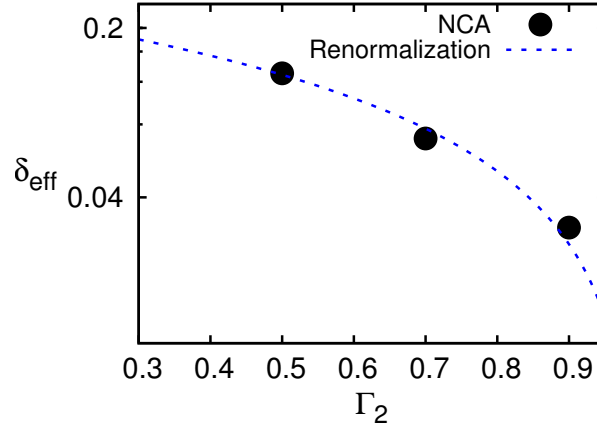


Figura 10.6: Desdoblamiento efectivo $\tilde{\delta}$ en función de Γ_2 . Los puntos corresponden a los valores obtenidos a partir de la posición de los picos de satélite en las densidades de estados. La línea azul discontinua es el resultado de la Ec. (10.1).

esta afinación depende de la propiedad que se estudia. En este sentido, la afirmación correcta no es que el sistema tiene simetría SU(4) sino que es más apropiada la afirmación de que con respecto a las ocupaciones o las conductancias o alguna propiedad (como se discute a continuación), el sistema se comporta como si la simetría fuese SU(4). Esto es lo que entendemos como una restauración efectiva de la simetría en este trabajo.

La idea detrás de la restauración de la simetría es compensar la separación efectiva. En el caso de diferentes hibridaciones $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$, la simetría puede ser restaurada por la introducción de un cierto desdoblamiento pseudo-Zeeman **negativo** $\delta = -\tilde{\delta}$. Si la energía del nivel cuyo acoplamiento es más débil es disminuida, es posible encontrar una temperatura a la que la diferencia de energía compensa el efecto de la renormalización diferenciada causada por los acoplamientos distintos. Esta compensación se puede comprobar, por ejemplo, en las ocupaciones n_i a bajas temperaturas. La evolución de $n_i(T)$ se muestra en la Fig. 10.7 para los tres casos analizados anteriormente: $\Gamma_1 = 1$, (a) $\Gamma_2 = 0.5$, (b) 0.7 y (c) 0.9. La energía del nivel localizado en QD1 está fija en $E_1 = -4$. La energía E_2 se elige inferior a E_1 en una cantidad $\tilde{\delta}$. En la Fig. 10.7(a) $E_2 = E_1 - 0.13$, (b) $E_2 = E_1 - 0.08$ y (c) $E_2 = E_1 - 0.03$. Esto corresponde a los desdoblamientos efectivos extraídos de la posición de los picos satélite en las densidades de estados.

Se puede observar en la Fig. 10.7 que como efecto de la compensación las ocupaciones $n_1 \sim n_2$ en un gran rango de temperaturas de hasta una temperatura T_{eff} donde $n_1(T_{\text{eff}}) = n_2(T_{\text{eff}})$. Por encima de T_{eff} , el doblete con la energía más baja E_2 está un poco más poblado. En T_{eff} las ocupaciones son las mismas, es decir, los dos estados tienen el mismo peso. Por debajo de T_{eff} el doblete que se hibrida más se convierte en la más poblado. Este cambio en el estado de menor energía es una consecuencia de la hibridación con los electrones de conducción. A pesar del hecho de que es posible hacer

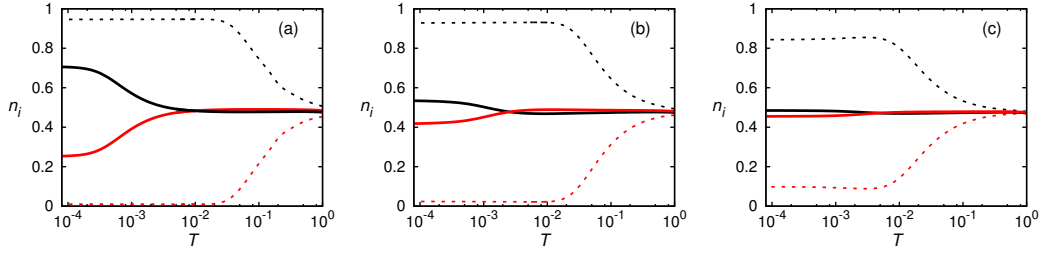


Figura 10.7: Ocupaciones en función de la temperatura para $\Gamma_1 = 1$, $\Gamma_2 = (a) 0.5$, (b) 0.7 y (c) 0.9 . La energía del nivel localizado en QD1 (en negro) es de $E_1 = -4$. La energía del otro doblete (en rojo), que tiene el acoplamiento más pequeño, se fija restando una cantidad que corresponde al desdoblamiento efectivo: $E_2 = E_1 - \tilde{\delta}$: (a) $\tilde{\delta} = 0.13$, (b) $\tilde{\delta} = 0.08$ y (c) $\tilde{\delta} = 0.03$. El caso $E_1 = E_2$ se muestra para comparación con líneas de trazos.

que las ocupaciones sean las mismas, no es necesariamente cierto que las densidades de estados también lo son. A $T = 0$ si $n_1 = n_2$, $\rho_1(0) = \rho_2(0)$ por la regla suma de Friedel. Como se verá más adelante, las densidades de estados se vuelven muy similares y dan la misma integral en T_{eff} . Sin embargo, la resonancia Kondo no es la misma, difieren cerca del nivel de Fermi. Esta es la razón por la que hablamos sólo de una restauración efectiva de la simetría SU(4).

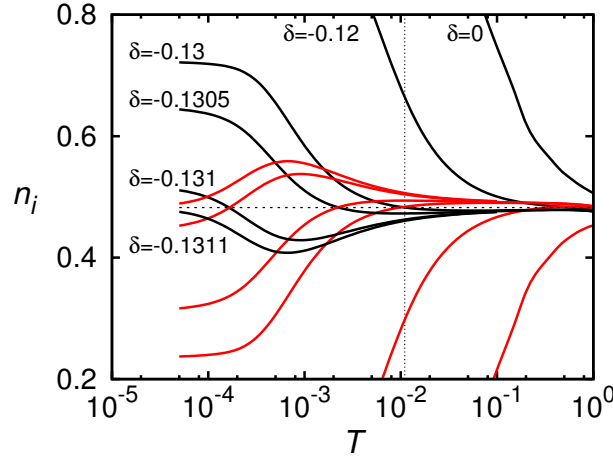


Figura 10.8: Ocupaciones n_i en función de la temperatura para varios valores del desdoblamiento pseudo-Zeeman $\delta = E_2 - E_1$. Las hibridaciones son $\Gamma_1 = 1$ y $\Gamma_2 = 0.5$, como en la Fig. 10.7(a). La línea negra (roja) corresponde al nivel localizada en QD1 (QD2), es decir, el nivel más (menos) hibridado.

La temperatura T_{eff} depende del campo δ . La elección de δ cerca del desdoblamiento efectivo, $\delta = -\tilde{\delta}$, tomado de la posición de los picos satélite en las densidades de estados es una buena estimación inicial. La temperatura de la restauración T_{eff} se puede variar órdenes de magnitud con el ajuste fino de δ . Diferentes curvas de $n_i(T)$ se presentan en la Fig. 10.8 para varios valores del desdoblamiento pseudo-Zeeman δ (fijado a priori) en el caso

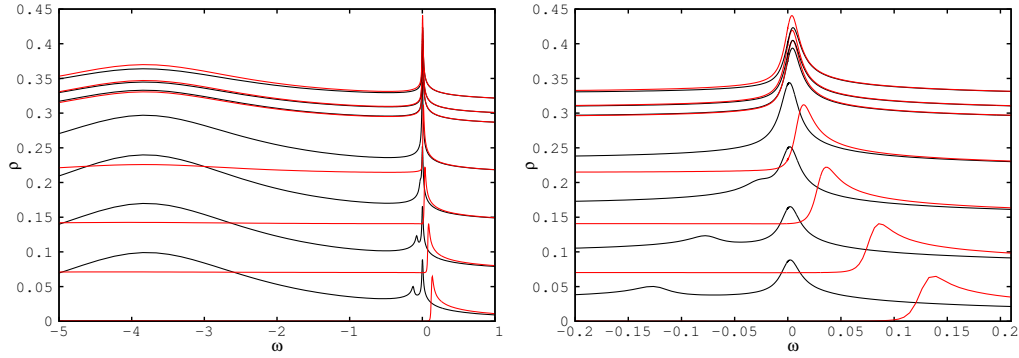


Figura 10.9: Evolución de las densidades de estados a bajas temperaturas con δ . El nivel localizado en QD1 (línea negro) tiene energía $E_1 = -4$ y el nivel en QD2 (línea roja) tiene energía $E_2 = E_1 + \delta$. Las curvas sucesivas corresponden a $-\delta = 0, 0.05, 0.1, 0.12, 0.13, 0.1305$ y 0.1309 . La temperatura es $T \approx 5 \cdot 10^{-3}$. (panel izquierdo) Rango de energías extendido para mostrar el pico de transferencia de carga. (panel derecho) Zoom cerca del nivel de Fermi.

$\Gamma_1 = 1, \Gamma_2 = 0.5$. Para $\delta = 0$, $E_1 = E_2$ y el estado localizado de QD1 (en negro), que tiene una hibridación más grande, se convierte en el más poblado. Un comportamiento similar se observa para los valores intermedios $-0.13 < \delta < 0$. No hay inversión de población hasta $\delta \approx -\tilde{\delta}$. La temperatura a la que las ocupaciones son las mismas se mueve de forma exponencial con el ajuste fino alrededor de este valor: en la figura, δ se varía entre -0.13 y -0.131 y T_{eff} cambia 0.01 a 0.0001 . Esta temperatura es muy baja y menor que $T_K(SU(4))$. En este rango, el nivel con E_2 está ligeramente más poblado que el otro hasta T_{eff} . Como se muestra en la figura, para $\delta < -0.131$ no hay inversión de población y el nivel localizado en QD2 se mantiene como el más poblado en todo el rango de temperatura. Este análisis muestra que la restauración efectiva de la simetría se puede conseguir moviendo la temperatura para un desdoblamiento pseudo-Zemman fijo o con una puesta a punto de las energías a una temperatura dada. En cualquier caso, esta afinación debe hacerse con cuidado.

La restauración efectiva de simetría observada en las ocupaciones $n_1(T_{eff}) = n_2(T_{eff})$ está relacionada con una modificación de la densidad de estados. En la Fig. 10.9, la densidad de estados para los dos pseudo-espines se muestran a la misma temperatura $T = 5 \cdot 10^{-3}$ para diferentes valores de δ en el caso $\Gamma_1 = 1$ y $\Gamma_2 = 0.5$ ($i = 1$ es negro y $i = 2$ es de color rojo). Las curvas están desplazadas artificialmente. En el panel izquierdo de la Fig. 10.9 se presenta un amplio rango de energías para incluir el pico de transferencia de carga en $\omega = -4$. Cuando la separación efectiva no está compensada ($E_1 = E_2$) la única contribución a ρ_2 es el pico satélite en $\omega = \tilde{\delta}$. No hay pico de transferencia de carga en la densidad de estados del nivel localizado en QD2 a pesar del hecho de que, a priori, que tienen la misma energía. El efecto de la compensación δ se observa primeramente cerca del nivel de Fermi (panel derecho). El pico satélite en ρ_2 desplaza hacia energías más bajas a

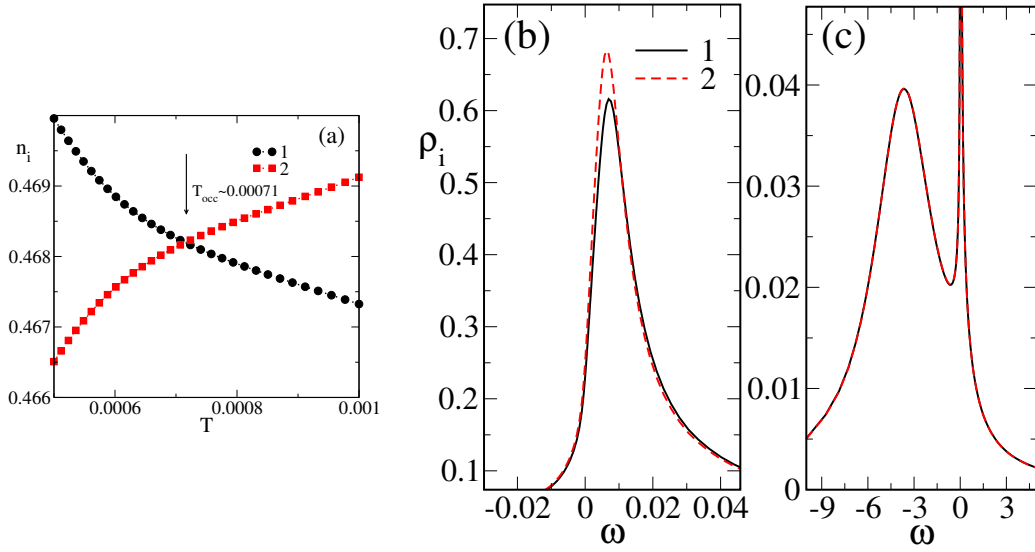


Figura 10.10: (a) Ocupación n_i en función de la temperatura para $\Gamma_1 = 1$ y $\Gamma_2 = 0.9$. Los dobletes tienen energías E_1 y $E_2 = E_1 + \delta$, con $\delta = -0.031$. La temperatura a la que las ocupaciones son la misma se indica con una flecha como T_{occ} . (b)(c) Las densidades de estados se comparan a T_{occ} . Tienen el mismo pico de transferencia de carga, pero las resonancias Kondo son ligeramente diferentes.

medida que δ está más cerca de $-\tilde{\delta}$. Como se puede observar en el panel izquierdo, para $\delta = -0.13$, el peso del pico de transferencia de carga se restaura en ρ_2 y ambas curvas son muy similares. Dado que estos resultados corresponden a una temperatura fija T , es posible encontrar un valor de δ en el que $T = T_{eff}$. En la figura, para $\delta = -0.1305$, $\rho_1(\omega = -4) \approx \rho_2(\omega = -4)$. Una vez que el desdoblamiento efectivo se compensa, las densidades de estados también son muy similares cerca del nivel de Fermi. Pero, como se ha indicado anteriormente, no es posible hacerlas coincidir en todo el rango de energías.

En la Fig. 10.10(b) y (c), una comparación entre las densidades de estados se muestra a la temperatura a la que las ocupaciones son las mismas con una buena precisión. Esta temperatura se indica con una flecha como T_{occ} en la Fig. (a). Se puede observar que, aunque las densidades de estado son muy similares, difieren cerca del nivel de Fermi. La resonancia Kondo del doblete con menor energía $E_2 = E_1 - |\delta|$ es mayor.

Dependiendo de la propiedad que se estudia, la sintonización de los parámetros puede ser diferente para conseguir la simetría efectiva. Esto se ilustra en la Fig. 10.11 donde las densidades de estados se comparan para diferentes condiciones. En la Fig. 10.11(a), los parámetros se afinan para hacerlas coincidir en el nivel de Fermi, $\rho_1(0) = \rho_2(0)$. Esta condición lleva a densidades de estados muy similares en todo el rango de energías. Las ocupaciones son ligeramente diferentes, $n_1(T) = 0.470$ y $n_2(T) = 0.465$ y la resonancia Kondo del doblete con la energía $E_2 = E_1 - |\delta|$ es mayor. El máximo se pro-

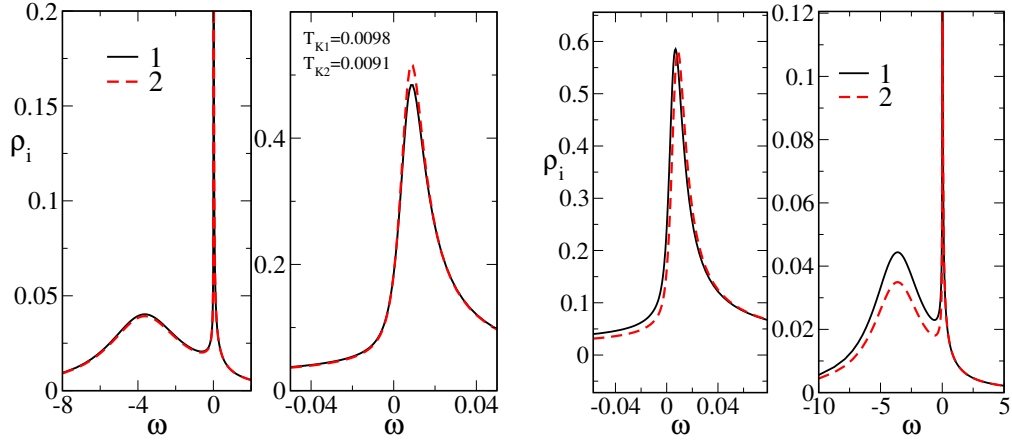


Figura 10.11: Densidades de estados para $\Gamma_1 = 1$, $\Gamma_2 = 0.9$ y $E_1 = -4$. (a) La energía se sintoniza a $E_2 = E_1 - 0.305$ y la temperatura $T = 0.37 \cdot 10^{-2}$ se elige para que ambos dobletes tengan la misma densidad de estados en el nivel de Fermi. Las ocupaciones son ligeramente diferentes $n_1(T) = 0.470$ y $n_2(T) = 0.465$. Las temperaturas Kondo son $T_{K1} = 0.0098$ y $T_{K2} = 0.0091$. (b) La energía se sintoniza a $E_2 = E_1 - 0.29$ y a una temperatura elegida para tener el mismo valor máximo en la densidad de estados.

duce casi en la misma posición y la forma de la resonancia corresponde a la del efecto Kondo SU(4) aunque $T_{K1} = 0.0098$ y $T_{K2} = 0.0091$. En la Fig. 10.11(b), los parámetros se eligen para obtener el mismo valor del máximo de la resonancia Kondo $\rho_1^{max} = \rho_2^{max}$. Cuando se cumple esta condición, el peso del pico de transferencia de carga es muy diferente para cada doblete, las ocupaciones no son similares y la resonancia en ρ_2 está desplazada hacia la derecha con respecto a ρ_1 .

10.4. Conclusiones

En este capítulo hemos explorado la posibilidad de obtener una simetría SU(4) efectiva en un sistema de dos puntos cuánticos incluso cuando los acoplamientos de los dos puntos a los cables no son los mismos. Aunque la simetría se rompe, dependiendo de la propiedad que se estudie, los parámetros pueden ajustarse de tal manera que las mediciones correspondan a un SU(4) emergente. Esto es relevante para entender resultados experimentales recientes [Keller et al., 2014].

PARTE III

Acoplamiento electrón-fonón

El acoplamiento a un modo bosónico

"There's really nothing remarkable about it. All you have to do is to hit the right key at the right time and the instrument plays itself."

J. S. Bach.

11.1 El Hamiltoniano electrón-fonón.

11.2 Un modelo electrónico efectivo.

[11.2.1] Apagando la hibridación.

[11.2.2] La transformación canónica.

[11.2.3] Estimación variacional del nivel de energía efectivo.

11.3 La solución numérica dentro de la NCA.

La **tercera parte** de esta tesis está dedicada al estudio de las propiedades de transporte de sistemas nanoscópicos donde hay otros grados de libertad relevantes además de los electrónicos. Entre estos sistemas, las moléculas son un ejemplo muy representativo, ya que presentan un acoplamiento importante entre los electrones y los modos vibracionales [Zhitenev et al., 2002] [Park et al., 2000] [Fernández-Torrente et al., 2008] [Ballmann et al., 2012]. La presencia de un grado de libertad bosónico acoplado a los electrones es un problema general que puede encontrarse en muchos escenarios diferentes. Por ejemplo, el acoplamiento del campo electromagnético de una cavidad, descrito en términos de modos normales, con un punto cuántico [Frey et al., 2012] o el acoplamiento de un sistema a un baño de osciladores como un modelo para la decoherencia [Nazarov and Blanter, 2009].

En particular, los sistemas en los que estamos interesados son los sistemas nanoscópicos interactuantes, i. e. donde las interacciones electrón-electrón son relevantes y no se pueden despreciar en una descripción realista. Este es el caso de los sistemas que han sido descritos en la **primera y segunda parte** de esta tesis. En estos sistemas, hay regiones donde los electrones se encuentran confinados formando átomos artificiales con estados localizados y un espectro discreto de energía [Kouwenhoven and Marcus, 1998]. Hay una energía de carga que representa el costo que implica tener

dos electrones en el mismo nivel y en función de los parámetros, diferentes comportamientos pueden observarse en las propiedades de transporte como consecuencia de las interacciones [Grabert and Devoret, 1992] [Kouwenhoven et al., 1997]. Como ejemplo, existe un régimen de bloqueo de Coulomb donde la conductancia cae a cero hasta que el costo de energía debido a la repulsión de Coulomb es suministrado por la fuente con el fin de poner un electrón extra en el sistema [Kastner, 1992]. Otro régimen interesante es el régimen de Kondo [Hewson, 1997]. Para un número impar de electrones en el sistema, en ausencia de campo magnético, el nivel de energía es un doblete. Si este doblete está profundo por debajo del nivel de Fermi y la repulsión de Coulomb es lo suficientemente grande, el estado localizado puede ser ocupado por un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo, pero no los dos al mismo tiempo. Hay procesos virtuales que implican a los electrones de conducción que apantallan el magnetismo debajo de cierta temperatura característica T_K formando un estado de muchos cuerpos singlete [Kouwenhoven and Glazman, 2001]. Este es el efecto Kondo que se manifiesta como un aumento en la densidad de estados del nivel localizado cerca del nivel de Fermi. Este pico se conoce como resonancia Kondo y su ancho está relacionado con la temperatura de Kondo T_K , que es la escala por debajo del cual las correlaciones se vuelven dominantes. El efecto Kondo se observa en las propiedades de transporte como un aumento de la conductancia a voltaje cero [Ng and Lee, 1988] [Glazman and Raikh, 1988] [Meir et al., 1993].

En presencia de un modo bosónico que se acopla a los grados de libertad electrónicos, hay diferentes efectos a tener en cuenta [König et al., 1996]. En primer lugar, hay una renormalización de los parámetros electrónicos relevantes: las energías de los niveles, la hibridación de los niveles localizados con las bandas de conducción, incluso de la interacción electrón-electrón. Este renormalización de los parámetros puede cambiar por completo el régimen de transporte y por lo tanto las propiedades observadas. Cómo sucede esto es muy difícil de predecir. En el caso de un sistema interactuante, el problema completo puede ser muy complicado y la mayoría de las cosas tienen que ser investigadas dentro de alguna aproximación [Paaske and Flensberg, 2005] [Cornaglia et al., 2005] [Balseiro et al., 2006] [Monreal and Martin-Rodero, 2009] [Hewson and Meyer, 2002]. En segundo lugar, la energía puede ser intercambiada entre los electrones y los bosones. La absorción o emisión de energía que implica la creación o destrucción de un bosón son procesos inelásticos disponibles que se observan en el transporte como características a tensión o temperatura finita [Kim et al., 2011]; por ejemplo, un aumento de la conductancia a un voltaje que corresponde a la energía de un modo bosónico. En tercer lugar, también hay que considerar el efecto del acoplamiento de los modos bosónicos con un estado electrónico de muchos cuerpos, tal como el estado Kondo. Como consecuencia de este acoplamiento, hay una renormalización de la escala en la que las correlaciones se vuelven dominantes, i.e. T_K . La dependencia de la temperatura de Kondo con la intensidad del acoplamiento al modo bosónico está todavía en debate [Hewson and Meyer, 2002]. Se plantea además la cuestión de si

este estado de muchos cuerpos virtual puede ser replicado de manera coherente a un espacio con un bosón más (o uno menos) [Roura-Bas et al., 2013] [Rakhmievitch et al., 2014].

En esta parte de la tesis se abordan estas cuestiones y se dan algunas respuestas parciales a este difícil problema. En este capítulo, se presenta y discute el formalismo. En particular, se presentan los diferentes enfoques para resolver el problema y la renormalización de los parámetros dentro de cada uno de ellos. En el **Capítulo 12**, se presenta el estudio del transporte fuera de equilibrio a través de moléculas vibrantes con especial énfasis en el régimen de Kondo.

Hay otra razón importante que hace relevante al estudio del acoplamiento con modos bosónicos para las propiedades de transporte. Como se ha discutido en el **primera parte** de esta tesis, en algunas moléculas y arreglos de puntos cuánticos es posible observar efectos de interferencia [Guédon et al., 2012] [Vazquez et al., 2012] [Valkenier et al., 2014]. El acoplamiento con los fonones (u otro modo bosónico) ha demostrado desempeñar un papel importante en el estudio de los fenómenos de interferencia [Härtle et al., 2011] [Ballmann et al., 2012]. La cuestión es si la interferencia es robusta en presencia de un modo bosónico o si resulta completamente borroneada. Esta cuestión se aborda parcialmente en el **Capítulo 13**.

11.1. El Hamiltoniano electrón-fonón

Los grados de libertad bosónicos a tener en cuenta son los modos vibracionales que pueden describirse con el Hamiltoniano

$$H_{\text{bos}} = \sum_q \hbar \omega_q (a_q^\dagger a_q + 1/2),$$

donde a_q^\dagger crea un bosón en el modo q con energía $\hbar \omega_q$. Esto describe fonones tipo Holstein [Mahan, 2000]. Los grados de libertad electrónicos se describen con el Hamiltoniano de Anderson

$$H_{\text{elec}} = E_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_k^\nu c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\nu k \sigma} (V_k^\nu d_\sigma^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}),$$

donde $n_d = \sum_\sigma n_{d\sigma}$, $n_{d\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$, d_σ^\dagger (d_σ) crea (destruye) un electrón con espín σ en el estado localizado (por ejemplo, de una molécula o punto cuántico), E_d es la energía de este nivel y U es la energía de la repulsión de Coulomb. $c_{\nu k \sigma}^\dagger$ ($c_{\nu k \sigma}$) es el operador de creación (destrucción) de un electrón de conducción a la izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$), y V_k^ν es el elemento de salto entre los cables y el estado localizado. Para cada energía $\epsilon_k^L = \epsilon_{k'}^R$ para las que hay estados a la izquierda y la derecha, sólo la combinación lineal $V_k^L c_{Lk\sigma} + V_{k'}^R c_{Rk'\sigma}$ se hibrida con el estado localizado. Así, el modelo es efectivamente un modelo de Anderson de un canal.

El acoplamiento entre los electrones y los bosones por medio de los procesos de absorción y emisión se tienen en cuenta con el Hamiltoniano

$$H_{\text{elec-bos}} = \sum_q \lambda_q (a_q^\dagger + a_q) n_d, \quad (11.1)$$

donde λ_q es la constante de acoplamiento electrón-bosón. Este Hamiltoniano acopla la carga en el sistema $\propto n_d$ con las coordenadas x_q del oscilador. En las moléculas, por ejemplo, la adición de un electrón produce un estiramiento de la molécula para minimizar la interacción electrostática, cuando se retira la carga extra, la energía elástica es relajada y la molécula vuelve a su posición de equilibrio (ver Fig. 11.1). Este es el acoplamiento representado por el Hamiltoniano en la Ec. (11.1).

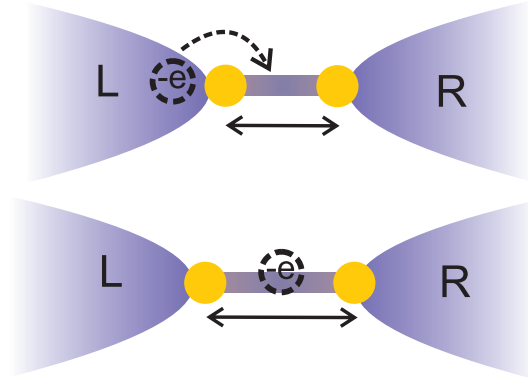


Figura 11.1: Ilustración del acoplamiento de la carga electrónica y un modo de estiramiento de la molécula.

En el caso en que hay muchos niveles de energía localizados, el Hamiltoniano total resulta

$$\begin{aligned} H_N = & \sum_i^N [E_i n_i + U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}] + \sum_{ij, i \neq j} \frac{U_{ij}}{2} n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} \\ & + \sum_{\nu k i \sigma} \epsilon_k^{\nu i} c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\nu k i \sigma} (V_k^{\nu i} d_{i \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \sum_q \hbar \omega_q (a_q^\dagger a_q + 1/2) + \sum_i \sum_q \lambda_q^i (a_q^\dagger + a_q) n_i, \end{aligned} \quad (11.2)$$

donde hay una repulsión entre nivel U_{ij} y cada nivel i se acopla a una banda diferente marcada también con i . Este Hamiltoniano corresponde a un modelo Anderson-Holstein SU(N) (ver Fig. 11.2(a)).

En el caso del modelo de Aligia (ver **Capítulo 5** y la Fig. 11.2(b)), que considera dos dobletes híbridos con un solo par de cables fuente-sumidero, el Hamiltoniano en presencia de fonones es

$$\begin{aligned} H_{\text{Aligia}} = & \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\alpha} \Omega_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} + \sum_{i \sigma} E_i d_{i \sigma}^\dagger d_{i \sigma} + \text{Coulomb repulsion} \\ & + \sum_{i \nu k \sigma} (V_{\nu}^i d_{i \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i \alpha \sigma} \lambda_{i \alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^\dagger) d_{i \sigma}^\dagger d_{i \sigma}. \end{aligned} \quad (11.3)$$

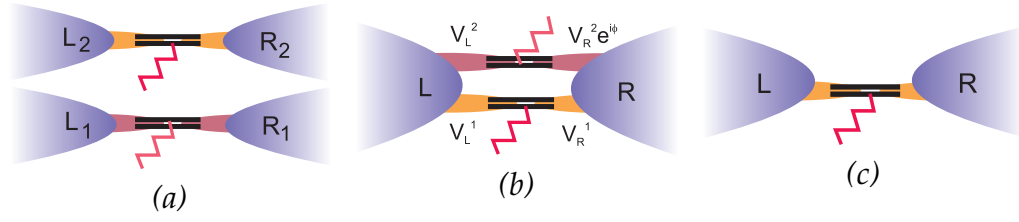


Figura 11.2: Representación de los diferentes modelos en presencia de los modos de vibración: (a) varios dobletes híbridos cada uno con un par de cables fuente-sumidero, (b) el modelo de Aligia y (c) un nivel localizado solo acoplado a ambos, electrones de conducción y vibraciones.

Para el resto de este capítulo y también el siguiente, sólo un nivel de energía E_d y un modo con frecuencia ω_0 son considerados. Esto se ilustra en la Fig. 11.2(c). Tomando $\hbar = 1$ y descartando un término de energía constante

$$\begin{aligned}
 H = & [E_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}] + \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_k^\nu c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \omega_0 a^\dagger a \\
 & + \sum_{\nu k \sigma} (V_k^\nu d_\sigma^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}) + \lambda (a^\dagger + a) n_d.
 \end{aligned} \tag{11.4}$$

Los estados localizados se acoplan a **dos diferentes grados de libertad**: por un lado, a los electrones de conducción a través de la hibridación V_k^ν ; por el otro lado, a los fonones a través de λ . El efecto del acoplamiento a la banda es dar una vida media a los estados localizados. El ancho adquirido en ausencia de interacciones es el ancho del nivel resonante $\Delta = \pi \rho_0 V^2$, para acoplamiento $V_k^\nu = V$, independiente del impulso y para una densidad de estados constante ρ_0 para los electrones de conducción. Esta hibridación disminuye la energía del sistema. Además, el acoplamiento a la banda lleva al efecto Kondo a bajas temperaturas cuando $E_d - \epsilon_F \ll \Delta$ y $E_d + U - \epsilon_F \gg \Delta$ (ϵ_F es el nivel de Fermi). Incluso para $\lambda = 0$, este problema interactuante es difícil de resolver exactamente. El acoplamiento a los fonones induce una minimización de la energía elástica. La carga eléctrica actúa sobre el modo de vibración como una fuerza. La minimización de la energía elástica se consigue mediante el desplazamiento de la posición de equilibrio del oscilador. Como se muestra a continuación, esto implica una disminución de la hibridación y afecta a las propiedades electrónicas del sistema, en particular a bajas temperaturas.

Si los dos acoplamientos son tratados como perturbaciones, un posible procedimiento sería considerar primero el acoplamiento más fuerte, resolver ese problema y luego incorporar la otra contribución. Para un fuerte acoplamiento con los fonones, esto significaría hacer alguna transformación y renormalizar los parámetros electrónicos y luego resolver el problema restante. En el otro límite, esto significaría considerar el acoplamiento a la banda primero y luego corregir con la presencia de fonones. Como se discute

siguiente sección, estos enfoques dan alguna pista acerca de los fenómenos observados. Sin embargo, algunos de los resultados encontrados de esta manera están en desacuerdo con los tratamientos más sofisticados [Hewson and Meyer, 2002].

Hemos hecho un cálculo tratando a ambos acoplamientos en igualdad de condiciones. Los resultados se presentan en el **Capítulo 12**. Los detalles sobre el tratamiento del acoplamiento electrón-fonón dentro de la aproximación *non-crossing* (NCA) se dan en la Sec. 11.3 y el **Apéndice E**. Consideramos que nuestros resultados ayudan a comprender mejor la manera complicada en la que el sistema localizado minimiza la energía en la presencia de ambos acoplamientos.

11.2. Un modelo electrónico efectivo

En ausencia de acoplamiento entre electrones y fonones ($\lambda = 0$), el modelo de la Ec. (11.4) se reduce al modelo de la impureza de Anderson ordinario y sus principales propiedades son bien conocidas. En particular, en el régimen de Kondo la escala característica de baja energía está dada por la temperatura de Kondo $T_K \sim \exp[-1/(\rho_0 J)]$, donde ρ_0 es la densidad de estados de los electrones de conducción de un dado espín, y para $U \rightarrow \infty$ (que corresponde a nuestros cálculos en la NCA) $J = 2|V_K|^2/(\epsilon_F - E_d)$ para V_K constante. Aquí ϵ_F es la energía de Fermi y K denota k, ν . En este límite de repulsión de Coulomb infinita, el régimen de Kondo corresponde a $\epsilon_F - E_d \gg \Delta$.

Si los electrones pudiesen desacoplarse de los fonones en alguna aproximación, se podría esperar obtener un **modelo puramente electrónico efectivo** H_{eff} de la forma del modelo ordinario de la impureza de Anderson, pero con **parámetros renormalizados**, \tilde{E}_d, \tilde{V}_K , que describan el movimiento electrónico. Esto llevaría a una temperatura de Kondo renormalizada $\tilde{T}_K \sim \exp[-1/(2\rho|\tilde{V}_k|^2/(\epsilon_F - \tilde{E}_d))]$.

Como se discute a continuación, la dependencia de T_K con λ es difícil de predecir. En cierta aproximación, la renormalización de los parámetros en un modelo electrónico efectivo conduce a una dependencia exponencial de T_K con λ . Según nuestros cálculos la dependencia es mucho más débil, no exponencial. Pero para analizar esto, es necesario definir \tilde{E}_d de alguna manera. Este es el tema de esta sección.

11.2.1. Apagando la hibridación

Si el acoplamiento a la banda está apagado, $V_K = 0$, el número total de electrones en el sistema n_d es un buen número cuántico y la interacción electrón-fonón λ puede ser eliminada por un simple corrimiento en los operadores de fonones $\beta^\dagger = a^\dagger - \hat{c}$, donde \hat{c} es un operador que depende de n_d . Esto simplemente refleja el hecho de que **la posición de equilibrio del**

modo normal depende de la ocupación. Dado

$$H^{V=0} = [E_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}] + \omega_0 a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a)n_d,$$

el corrimiento implica

$$\begin{aligned} \omega_0 a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a)n_d &= \omega_0 (\beta^\dagger + \hat{c})(\beta + \hat{c}) + \lambda(\beta^\dagger + \beta + 2\hat{c})n_d \\ &= \omega_0 (\beta^\dagger \beta + \hat{c}^2) + \omega_0 \hat{c}(\beta^\dagger + \beta) + \lambda(\beta^\dagger + \beta)n_d + 2\lambda\hat{c}n_d, \end{aligned}$$

que puede ser diagonalizado eligiendo

$$\hat{c} = -\frac{\lambda}{\omega_0} n_d, \quad (11.5)$$

por tanto

$$\omega_0 a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a)n_d = \omega_0 \beta^\dagger \beta - \frac{\lambda^2}{\omega_0} n_d^2.$$

Hay un cambio de energía $\Delta E = -\frac{(\lambda n_d)^2}{\omega_0}$. El valor de \hat{c} se define para cada n_d . Para $n_d = 1$, la corrección de la energía se puede incorporar en E_d y para $n_d = 2$ también en U ,

$$\tilde{E}_d^0 = E_d - \frac{\lambda^2}{\omega_0}, \quad \tilde{U} = U - 2\frac{\lambda^2}{\omega_0}. \quad (11.6)$$

Estos son los parámetros renormalizados para $V_K = 0$. El Hamiltoniano con estos parámetros es

$$H^{V=0} = \tilde{E}_d^0 n_d + \tilde{U} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \omega_0 \left(a^\dagger + \frac{\lambda}{\omega_0} n_d \right) \left(a + \frac{\lambda}{\omega_0} n_d \right). \quad (11.7)$$

Para ω_0 muy grande, el último término de la Ec. (11.7) se puede descartar y $H^{V=0}$ se reduce a un modelo puramente electrónico con parámetros efectivos. En esta aproximación **anti-adiabática**, cuando se incluye el término de hibridación, este resulta reducido de manera exponencial debido al hecho de que se mezcla estados con diferentes n_d , y el producto escalar de las funciones de onda del fonón con diferentes posiciones de equilibrio conduce a un factor $\tilde{V}_K/V_K = \exp[-(\lambda/\omega_0)^2/2]$. (véase la Fig. 11.3).

En este límite anti-adiabático con $\omega_0 \rightarrow \infty$ el Hamiltoniano efectivo se convierte en

$$H_{\text{eff}} = \tilde{E}_d n_d + \tilde{U} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{K\sigma} \epsilon_K c_{K\sigma}^\dagger c_{K\sigma} + (\tilde{V}_K d_\sigma^\dagger c_{K\sigma} + \text{H.c.}), \quad (11.8)$$

con $\tilde{E}_d = \tilde{E}_d^0$. Debido a la reducción exponencial de la hibridación con λ , la temperatura de Kondo también se reduce de forma exponencial. Este comportamiento no se encuentra en un análisis más sofisticado. El límite de $\omega_0 \rightarrow \infty$ sin embargo, no es realista.

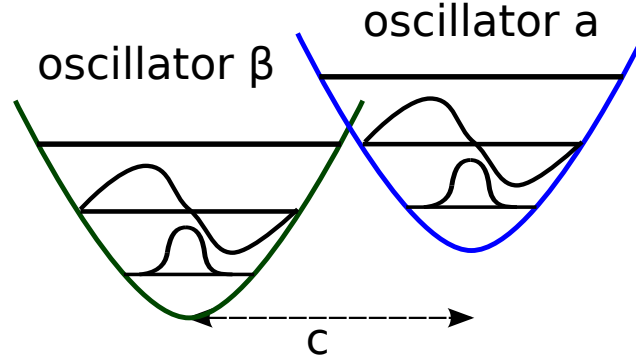


Figura 11.3: Representación del efecto del acoplamiento de electrones y fonones para $V_K = 0$. Cuando la hibridación es cero, el número de electrones en el sistema n_d es un buen número cuántico. El acoplamiento electrón-fonón puede ser absorbido como un cambio en la posición de equilibrio del oscilador. El oscilador **a** corresponde a $n_d = 0$ y el oscilador **β** a $n_d = 1$. Las funciones de onda del fonón de estos osciladores están desplazadas una respecto a la otra en una cantidad $c = -\frac{\lambda}{\omega_0}$. También hay un cambio de energía $\Delta E = -\frac{(\lambda n_d)^2}{\omega_0}$.

11.2.2. La transformación canónica

En el caso de $V_K \neq 0$, todavía es posible eliminar el acoplamiento de electrones y fonones por medio de una transformación canónica. Dado el Hamiltoniano H la idea es aplicar una transformación $e^S H e^{-S}$ para desplazar la posición de equilibrio del oscilador (esto se llama una transformación unitaria Lang-Firsov). Para este propósito, la matriz de transformación está escrita en términos del operador impulso (que actúa como un operador de traslación para las coordenadas fonónicas)

$$S = \frac{\lambda}{\omega_0} (a^\dagger - a) n_d.$$

Los operadores transformados se pueden encontrar con la ayuda de la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$e^S A e^{-S} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[S, A]_m}{m!} = A + [S, A] + \frac{1}{2}[S, [S, A]] + \frac{1}{6}[S, [S, [S, A]]] + \dots$$

Para los operadores del nivel localizado,

$$e^S d_\sigma e^{-S} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\frac{\lambda}{\omega_0} (a^\dagger - a) n_d, d_\sigma]_m}{m!} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\omega_0} (a^\dagger - a) \right)^m \frac{[n_d, d_\sigma]_m}{m!},$$

donde $[n_d, d_\sigma] = -d_\sigma$, por lo tanto

$$e^S d_\sigma e^{-S} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{\lambda}{\omega_0} (a^\dagger - a) \right)^m (-1)^m d_\sigma = e^{-\frac{\lambda}{\omega_0} (a^\dagger - a)} d_\sigma.$$

Análogamente, $e^S d_\sigma^\dagger e^{-S} = e^{\frac{\lambda}{\omega_0}(a^\dagger - a)} d_\sigma^\dagger$. La transformación de los operadores de fonones conduce a

$$e^S a e^{-S} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\frac{\lambda}{\omega_0}(a^\dagger - a)n_d, a]_m}{m!} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\omega_0} n_d\right)^m \frac{[a^\dagger, a]_m}{m!} = a - \frac{\lambda n_d}{\omega_0}$$

como se esperaba y $e^S a^\dagger e^{-S} = a^\dagger - \frac{\lambda n_d}{\omega_0}$. Los electrones de conducción no se ven afectados por la transformación. En resumen, los operadores transformados son

$$\begin{aligned} \tilde{d}_\sigma &= e^{-\frac{\lambda}{\omega_0}(a^\dagger - a)} d_\sigma, & \tilde{d}_\sigma^\dagger &= e^{\frac{\lambda}{\omega_0}(a^\dagger - a)} d_\sigma^\dagger, \\ \tilde{a}^\dagger &= a^\dagger - \frac{\lambda n_d}{\omega_0}, & \tilde{a} &= a - \frac{\lambda n_d}{\omega_0}. \end{aligned}$$

La transformación aplicada al Hamiltoniano $H_0 + \lambda H_1$ de la Ec. (11.4) da

$$\begin{aligned} e^S H_0 e^{-S} &= [E_d e^S n_d e^{-S} + U e^S n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} e^{-S}] + \omega_0 e^S a^\dagger a e^{-S} \\ &+ \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_k^\nu c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\nu k \sigma} (V_k^\nu e^S d_\sigma^\dagger e^{-S} c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}), \\ e^S \lambda H_1 e^{-S} &= \lambda e^S (a^\dagger + a) n_d e^{-S}, \end{aligned}$$

donde la primera parte da

$$\begin{aligned} e^S H_0 e^{-S} &= [E_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}] + \omega_0 \left(a^\dagger - \frac{\lambda n_d}{\omega_0}\right) \left(a - \frac{\lambda n_d}{\omega_0}\right) \\ &+ \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_k^\nu c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\nu k \sigma} (V_k^\nu \tilde{d}_\sigma^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}), \end{aligned}$$

y la segunda

$$e^S \lambda H_1 e^{-S} = \lambda (e^S a^\dagger e^{-S} + e^S a e^{-S}) e^S n_d e^{-S} = \lambda n_d (a^\dagger + a) - 2 \frac{\lambda^2 n_d^2}{\omega_0}.$$

El Hamiltoniano transformado $\tilde{H} = e^S (H_0 + \lambda H_1) e^{-S}$ resulta

$$\tilde{H} = \left[\tilde{E}_d^V n_d + \tilde{U} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \right] + \omega_0 a^\dagger a + \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_k^\nu c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\nu k \sigma} (V_K \tilde{d}_\sigma^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}),$$

donde $\tilde{E}_d^V = \tilde{E}_d^0 = E_d - \frac{\lambda^2}{\omega_0}$ y $\tilde{U} = U - 2 \frac{\lambda^2}{\omega_0}$. La interacción electrón-fonón se ha eliminado usando una transformación de Lang-Firsov pero el precio a pagar es que \tilde{V}_K incluye exponenciales de los operadores de fonones. Para obtener un modelo electrónico efectivo generalmente se trata con una aproximación de desacoplamiento que como en el límite anti-adiabático conduce a una dependencia exponencial de T_K en λ para \tilde{E}_d^0 fijo. Esto no se encuentra en los tratamientos más elaborados [Hewson and Meyer, 2002].

En cualquier caso, si el límite anti-adiabático, o una aproximación de desacoplamiento que conducen a un Hamiltoniano puramente electrónico H_{eff} tienen que ser abandonados, es interesante preguntarse si el nivel de

energía renormalizado \tilde{E}_d está aún dado por \tilde{E}_d^0 [primera Ec. (11.6)] en un tratamiento más elaborado. Esta ecuación viene de la optimización de la energía descuidando la hibridación, que lleva a un corrimiento en la posición de equilibrio del oscilador (dado por la Ec. (11.5)). Esto a su vez conduce a una reducción exponencial de la hibridación. Sería de esperar que para hibridación grande, un corrimiento más pequeño tenga lugar con una ganancia más pequeña de energía elástica pero una ganancia más grande en la energía de hibridación, que pasa ser más conveniente.

La energía efectiva se puede definir como

$$\tilde{E}_d = \frac{\langle g|P_1 H P_1|g\rangle}{\langle g|P_1|g\rangle} - \frac{\langle g|P_0 H P_0|g\rangle}{\langle g|P_0|g\rangle}, \quad (11.9)$$

donde $|g\rangle$ es el estado fundamental y P_n es un proyector en el subespacio con $n_d = n$. Se muestra en la siguiente sección cómo \tilde{E}_d se puede estimar utilizando una aproximación variacional simple, donde el desplazamiento del oscilador \hat{c} se reemplaza por una constante c obtenida minimizando la energía del estado fundamental.

De acuerdo con nuestros resultados, el corrimiento tiene de hecho una magnitud menor que λ/ω_0 y hay un cambio menor de \tilde{E}_d que el correspondiente a la Ec. (11.6) para cero hibridación. Sin embargo, el enfoque variacional es demasiado simple y no pretendemos que este resultado sea cuantitativamente válido. Los aspectos cualitativos se discuten en el **Capítulo 12**.

11.2.3. Estimación variacional del nivel de energía efectivo

El nivel de energía renormalizado \tilde{E}_d se puede calcular proponiendo una función de onda variacional sencilla

$$|\psi\sigma\rangle = A \left\{ |\psi_{d\sigma}\rangle |0_\beta\rangle + \sum_K \alpha_K |\psi_{K\sigma}\rangle |0_a\rangle \right\}, \quad (11.10)$$

donde $|\psi_{d\sigma}\rangle = d_\sigma^\dagger |F\rangle$, $|\psi_{K\sigma}\rangle = c_{K\sigma}^\dagger |F\rangle$, $|F\rangle$ es el mar de Fermi lleno de electrones de conducción, $c_{K\sigma}^\dagger$ ($K = \nu \mathbf{k}$) crea un estado de conducción por encima de la energía de Fermi, y $|0_a\rangle$ es el vacío de fonones a ($a|0_a\rangle = 0$), mientras que $|0_\beta\rangle$ es el vacío del fonón desplazado definido por $\beta^\dagger = a^\dagger - c$, donde c es un parámetro variacional real, como A y α_K , que se determinan mediante la minimización de la energía.

Hay que tener en cuenta que esta función de onda, en contraste con la propuesta por Varma y Yafet (VY) [Yafet and Varma, 1985], no es un singlete sino un doblete. Aunque la elección de VY conduce a una ganancia de energía del orden de la temperatura de Kondo, que depende exponencialmente en la hibridación V_K , y da el espín correcto ($S = 0$) del estado fundamental, nuestro doblete gana más energía, con una diferencia proporcional a $|V_K|^2$ en el límite de Kondo. En este límite, una comparación de la ocupación local $\langle n_d \rangle = \partial E / \partial E_d$, donde E es la energía total, con el grupo

de renormalización numérica (NRG) sugiere que la ganancia de energía es cualitativamente correcta (aproximadamente la mitad del valor correcto) y mucho mejor que la predicha por la aproximación de bosones esclavos en campo medio [Roura-Bas et al., 2012b].

Escribiendo $|0_\beta\rangle = \sum_n C_n (a^\dagger)^n |0_\alpha\rangle$ en una base de ocupaciones de los fonones a , utilizando la ecuación $\beta|0_\beta\rangle = (a - c)|0_\beta\rangle = 0$, es fácil ver que $\langle 0_\alpha|0_\beta\rangle = \exp(-c^2/2)$. Usando esto y minimizando $\langle\psi\sigma|H|\psi\sigma\rangle - E(\langle\psi\sigma|\psi\sigma\rangle - 1)$ con respecto a A ,

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle\psi\sigma|H|\psi\sigma\rangle}{\langle\psi\sigma|\psi\sigma\rangle} = E_F + E_d + 2\lambda c + \omega_0 c^2 \\ &+ 2e^{-c^2/2} \sum_K \alpha_K V_K + \sum_K \alpha_K^2 (E_F + \epsilon_K - E), \end{aligned} \quad (11.11)$$

donde E_F es la energía de $|F\rangle$.

Minimizando con respecto a α_K y c

$$\begin{aligned} \alpha_K &= -\frac{V_K e^{-c^2/2}}{E_F + \epsilon_K - E}, \\ c &= -\frac{\lambda}{\omega_0 - e^{-c^2/2} \sum_K \alpha_K V_K}. \end{aligned} \quad (11.12)$$

Usando la primera ecuación para eliminar α_K , asumiendo por simplicidad $V_K = V$ constante, una densidad de estados constante para los electrones de conducción ρ_0 extendiéndose hasta $\epsilon_F + D$ y llamando a $\Delta = \pi\rho_0 V^2$, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} c &= -\frac{\lambda}{\omega_0 + e^{-c^2} \gamma(\epsilon)}, \\ \epsilon &= 2\lambda c + \omega_0 c^2 - e^{-c^2} \gamma(\epsilon), \end{aligned} \quad (11.13)$$

con las definiciones $\epsilon = E - E_F - E_d$, $\gamma(\epsilon) = (\Delta/\pi) \ln |1 - D/(E_d + \epsilon)|$. Después de resolver el sistema, utilizando la Ec. (11.9) y teniendo en cuenta que en el límite de Kondo los α_K significativos son aquellos con ϵ_K muy cerca de ϵ_F ,

$$\tilde{E}_d = \langle\psi_{d\sigma}|\langle 0_\beta|H|0_\beta\rangle|\psi_{d\sigma}\rangle - \langle\psi_{K\sigma}|\langle 0_a|H|0_a\rangle|\psi_{K\sigma}\rangle, \quad (11.14)$$

con $K = K_F$ en la esfera de Fermi. El resultado puede ser escrito como

$$\tilde{E}_d = E_d - \frac{\lambda^2}{\omega_0} (2\tilde{c} - \tilde{c}^2), \quad (11.15)$$

donde $\tilde{c} = -\omega_0 c/\lambda$ es un número adimensional, con $0 \leq \tilde{c} \leq 1$. De la primera Ec. (11.13), es evidente que $\tilde{c} = 1$ para $V_K = 0$ como se esperaba. En el **Capítulo 12** se discute la relevancia de esta corrección.

11.3. La solución numérica dentro de la NCA

Con el fin de tratar el acoplamiento entre electrones y fonones y el problema de la interacción electrónica, hemos ampliado la aproximación *non-crossing* (NCA) aplicada al límite de U infinito del modelo de Anderson, para incluir explícitamente el efecto de los fonones. Para el caso de un doblete, la comparación de NCA con resultados del NRG muestra que la NCA describe bastante bien la física del Kondo [Costi et al., 1995]. El comportamiento principal de la conductancia diferencial a voltaje pequeño y baja temperatura está de acuerdo con enfoques alternativos para un líquido de Fermi, y la dependencia de la conductancia con la temperatura coincide prácticamente con el resultado del NRG en varias décadas de temperatura [Bas, 2010]. Una deficiencia de la NCA es que, a temperaturas muy bajas, se introduce un pico espúreo en la energía de Fermi en la densidad espectral cuando el estado fundamental del sistema aislado de los cables es no degenerado, aunque las propiedades termodinámicas siguen estando bien descritas. Por lo tanto, el método se limita a temperaturas superiores a $\sim T_K/20$, donde T_K es la temperatura de Kondo. Una ventaja del método es que es una aproximación conservativa y da la dependencia exponencial correcta de T_K con la energía del estado localizada E_d . Mientras que el NRG es más preciso a bajas energías, la NCA tiene la ventaja comparativa de que se puede extender más fácilmente a las situaciones de no equilibrio. Además, es capaz de capturar características a altas energías, tales como picos en la densidad espectral fuera del nivel de Fermi, que podrían estar ensanchados o incluso ser pasados por alto en cálculos del NRG [Bas and Aligia, 2009].

La extensión de la NCA para incluir los fonones se explica aquí brevemente. Los detalles de la aproximación *non-crossing* se pueden encontrar en la Sec. A.5 del **Apéndice A** y en los **Apéndices B** y **C**. El tratamiento de los fonones se discute en el **Apéndice E**. Un bosón esclavo b , y dos fermiones esclavos f_σ son introducidos. $b^\dagger|0\rangle$ representa el estado sin partículas en el nivel localizado ¹, y los fermiones físicos están dados por $d_\sigma^\dagger = f_\sigma^\dagger b$. Estas pseudo-partículas deben satisfacer la restricción

$$b^\dagger b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} = Q, \quad (11.16)$$

con $Q = 1$, que se impone introduciendo un multiplicador de Lagrange Λ . Un truco habitual es tomar $\Lambda \rightarrow \infty$ al final para proyectar sobre el subespacio físico de $Q = 1$. Las cantidades de interés se pueden expresar en términos de las funciones de Keldysh menores y mayores para las pseudo-partículas, que para los procesos de no equilibrio en el régimen estacionario se definen como

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{<}(t-t') &= +i\langle f_{\sigma}^{\dagger}(t')f_{\sigma}(t) \rangle, \\ D^{<}(t-t') &= -i\langle b^{\dagger}(t')b(t) \rangle, \\ G_{\sigma}^{>}(t-t') &= -i\langle f_{\sigma}(t)f_{\sigma}^{\dagger}(t') \rangle, \\ D^{>}(t-t') &= -i\langle b(t)b^{\dagger}(t') \rangle. \end{aligned} \quad (11.17)$$

¹En el caso de una molécula, esto correspondería a un nivel molecular

Estas funciones de Green corresponden a los propagadores interactuantes (vestidos). En el presente caso, también es necesario añadir las funciones de Green de los fonones:

$$\begin{aligned} A^<(t-t') &= -i\langle a^\dagger(t')a(t) \rangle = -in(\omega_0) \exp(-i(t-t')\omega_0), \\ A^>(t-t') &= -i\langle a(t)a^\dagger(t') \rangle = -i(n(\omega_0) + 1) \exp(-i(t-t')\omega_0). \end{aligned} \quad (11.18)$$

En el último miembro, se ha utilizado el resultado para los fonones no interactuantes, donde $n(\omega) = [\exp(\omega/k_B T) - 1]^{-1}$ es la función de distribución de Bose-Einstein. Esto se debe a que el diagrama a orden λ^2 que corrige el resultado no interactuante contiene dos líneas de pseudo-fermiones (ver diagrama para Σ_a en la Fig. 11.4). Estos diagramas se anulan en el límite de $\Lambda \rightarrow \infty$ (como el correspondiente a la auto-energía de los electrones de conducción). Por lo tanto, las funciones de Green de fonones no se corrigen dentro de la NCA.

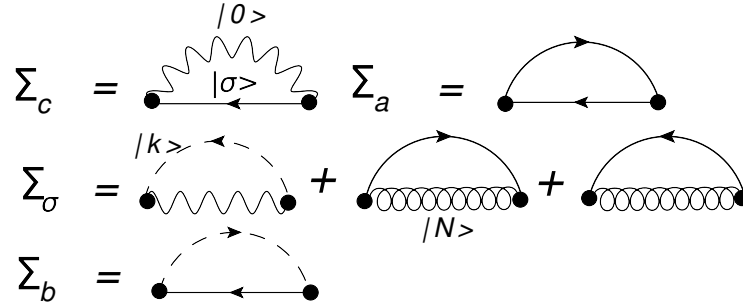


Figura 11.4: Auto-energías obtenidas dentro de la NCA para la contribución electrónica y el acoplamiento electrón-fonón. La flecha de línea continua recta (ondulada) corresponde al propagador de la pseudo-partícula fermiónica (bosónica). Las líneas de trazos representan los electrones de conducción y líneas rizadas los fonones. Los dos primeros diagramas se anulan en el tratamiento de la NCA (ver texto). El diagrama para el término de Hartree está en la Fig. 1(c) de Ref. [Martin-Rodero et al. \[2008\]](#).

Las funciones de Green retardadas y avanzadas para los fermiones son $G_\sigma^R(t) = \theta(t)[G_\sigma^>(t) - G_\sigma^<(t)]$, $G_\sigma^a = G_\sigma^r + G_\sigma^< - G_\sigma^>$, y lo mismo para las funciones de Green bosónicas.

Dentro de la NCA, los diagramas de auto-energía se calculan como a segundo orden en la interacción bosón-fermión $\sum_{\nu k \sigma} (V_k^\nu f_\sigma^\dagger b_{c\nu k \sigma} + \text{H.c.})$ y la interacción electrón-fonón $\lambda(a^\dagger + a) \sum_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma$, pero sustituyendo los propagadores desnudos por los vestidos, que se determinan auto-consistentemente. Esto es equivalente a una suma parcial de diagramas de todos los órdenes en la teoría de perturbaciones (todos los que no tienen cruces).

La mayoría de las ecuaciones integrales auto-consistentes toman la misma forma que en el caso $\lambda = 0$. En la Fig. 11.4, se muestran los diagramas para las diferentes auto-energías. La única diferencia es que las energías menores y mayores para los pseudo-fermiones incluyen las correcciones electrón-fonón $\Sigma_{\text{ph},\sigma}^\lessgtr$ que se indican a continuación, y la auto-energía retardada contiene el término de Hartree $E_H = -2 \sum_\sigma \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle \lambda^2 / \omega_0$, que es independiente de frecuencia. Este término se anula para $\Lambda \rightarrow \infty$.

Las correcciones de Σ^{\lessgtr} debido a fonones son

$$\Sigma_{\text{ph},\sigma}^{\lessgtr}(\omega) = \frac{i\lambda^2}{2\pi} \int d\omega' G_{\sigma}^{\lessgtr}(\omega + \omega') [A^{\lessgtr}(-\omega') + A^{\gtrless}(\omega')] . \quad (11.19)$$

Sumando esto a la contribución de la hibridación y usando las Ecs. (11.18), las auto-energías resultan

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^{<}(\omega) = & \lambda^2 [n(\omega_0)G_{\sigma}^{<}(\omega - \omega_0) + (n(\omega_0) + 1)G_{\sigma}^{<}(\omega + \omega_0)] \\ & - \sum_{\nu} \Gamma_{\nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} f_{\nu}(\omega - \omega') D^{<}(\omega'), \end{aligned} \quad (11.20)$$

y

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^{>}(\omega) = & \lambda^2 [n(\omega_0)G_{\sigma}^{>}(\omega + \omega_0) + (n(\omega_0) + 1)G_{\sigma}^{>}(\omega - \omega_0)] \\ & + \sum_{\nu} \Gamma_{\nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - f_{\nu}(\omega - \omega')) D^{>}(\omega'), \end{aligned} \quad (11.21)$$

donde $f_{\nu}(\omega) = [\exp[(\omega - \mu_{\nu})/k_B T] + 1]^{-1}$, μ_{ν} es el potencial químico del cable ν , y

$$\Gamma_{\nu}(\omega) = 2\pi \sum_k |V_k^{\nu}|^2 \delta(\omega - \epsilon_k^{\nu}), \quad (11.22)$$

es la función de hibridación supuesta independiente de ω .

Con excepción de las Ecs. (11.20) y (11.21), el resto del formalismo, incluyendo la ecuación de la corriente ², tiene la misma forma que para el caso sin fonones.

²Esto se explica en detalle en el **Capítulo 3**.

Transporte fuera de equilibrio a través de moléculas magnéticas vibrantes

- 12.1 La densidad de estados en presencia de fonones.
- 12.2 La dependencia de T_K con el acoplamiento electrón-fonón.
- 12.3 Densidades de estados y conductancia fuera de equilibrio.
- 12.4 Discusión y conclusiones.

En este capítulo presento nuestros resultados sobre las propiedades de transporte de moléculas vibrantes. Hemos calculado la conductancia fuera de equilibrio a través de una molécula o un punto cuántico en el que la ocupación del nivel electrónico correspondiente está acoplada con intensidad λ a un modo de fonones, y también a dos cables conductores. Como se introdujo en el **Capítulo 11**, el sistema se describe con el Hamiltoniano de Anderson-Holstein. El problema se resuelve utilizando el formalismo de Keldysh y la aproximación *non-crossing* (NCA) para ambos, la interacción con los electrones de conducción y las interacciones electrón-fonón. Esto es muy importante ya que permite tratar ambos acoplamientos en igualdad de condiciones. Obtenemos una disminución moderada de la temperatura de Kondo T_K con λ manteniendo fija la energía renormalizada del nivel localizado \tilde{E}_d . Se discuten el significado y el valor de \tilde{E}_d . La densidad de estados para los electrones localizados muestra además del pico Kondo de ancho $2T_K$, réplicas de este pico desplazado en múltiplos de la frecuencia de fonones ω_0 . La conductancia de no equilibrio en función del voltaje V_b a temperaturas bajas también muestra picos en múltiplos de ω_0 además del pico Kondo central dominante cerca $V_b = 0$.

12.1. La densidad de estados en presencia de fonones

Los detalles del formalismo y las definiciones se dan en el **Capítulo 11** (ver Sec. 11.3). Para los cálculos numéricos, consideramos una densidad de

estados constante por espín ρ_0 entre $-D$ y D para los cables, con $D = 10$. La frecuencia del modo fonónico $\omega_0 = 1$ se toma como la unidad de energía. La hibridación es $\Gamma_L = \Gamma_R = \Delta$, donde Δ es el ancho nivel resonante, i.e. la mitad del ancho a la mitad del máximo de la densidad de estados en ausencia de interacciones. Sin pérdida de generalidad, se supone $\epsilon_F = 0$, donde ϵ_F es el nivel de Fermi de los cables sin voltaje V_b aplicado. Se considera que para V_b finito, la caída de tensión es simétrica, lo que conduce a potenciales químicos $\mu_L = eV_b/2$ y $\mu_R = -eV_b/2$ para los cables. En la Sec. 12.3, se discute la conductancia de no equilibrio para un caso de caída de tensión e hibridaciones asimétricas.

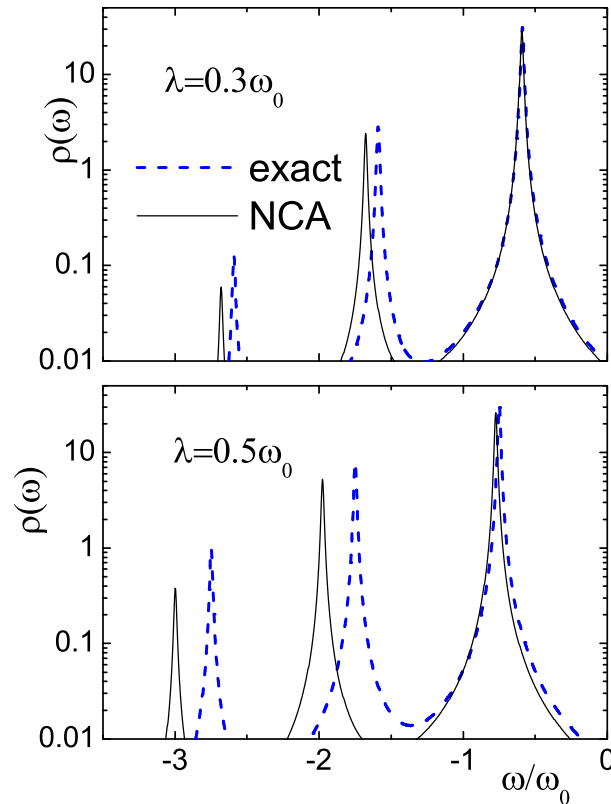


Figura 12.1: Comparación de la NCA y los resultados exactos de la densidad de estados electrónica por espín en función de la frecuencia para $V_k^\nu = 0$ y dos valores de λ . Otros parámetros son: $\omega_0 = 1$, $E_d = -0.5$, y $T = 0$. Se añadió una parte imaginaria de magnitud 0.01 para ensanchar artificialmente los diferentes picos.

La primera tarea es poner a prueba la NCA para el acoplamiento electrón-fonón. En la Fig. 12.1 la densidad de estados del nivel localizado $\rho_{d\sigma}(\omega)$ se muestra en el caso particular de hibridación cero $V_k^\nu = 0$. El resultado para dos valores de la interacción electrón-fonón λ se puede comparar con el resultado exacto. La escala en la figura es logarítmica para hacer visible la segunda réplica del pico principal. Como se discutió en el **Capítulo 11**, para $V_k^\nu = 0$ la ocupación n_d es un buen número cuántico y el problema puede ser resuelto exactamente desplazando los operadores de fonones a de la forma $\beta = a - \hat{c}$, con \hat{c} una función de la ocupación [ver la Ec. (11.7)]. Para $n_d = 1$, la

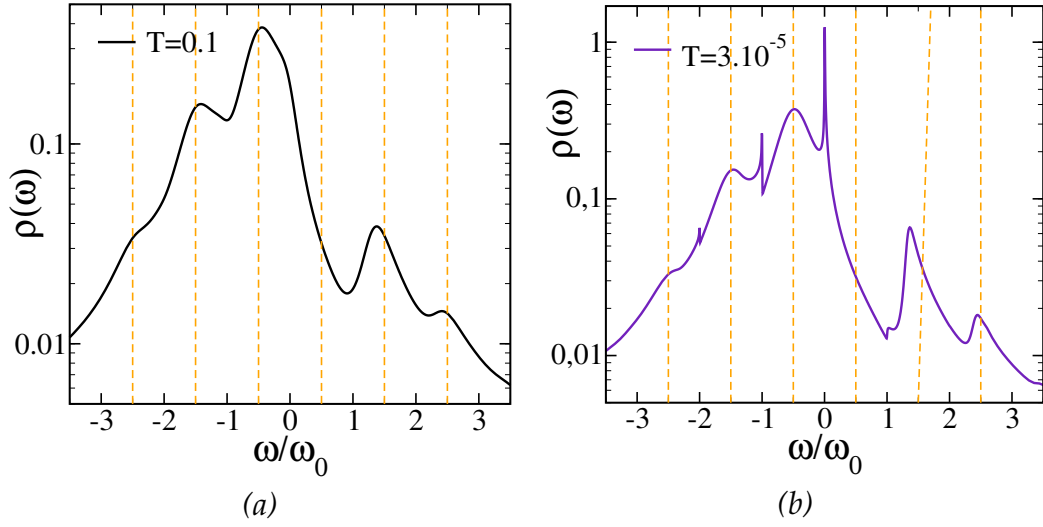


Figura 12.2: Densidad de estados electrónica por espín como función de la frecuencia para (a) una alta temperatura $T = 0.1 \gg T_K$ y (b) una temperatura muy baja $T = 5 \cdot 10^{-5} < T_K$. $\omega_0 = 1$, $\lambda = 0.7$, $\Delta = 0.2\omega_0$ y $\tilde{E}_d^0 = -0.5$. La escala del eje vertical es logarítmica. Las líneas de trazos corresponden a la posición de las réplicas esperadas.

posición de equilibrio del oscilador β se desplaza con respecto a la de a . Este cambio no está explícito en la NCA y no es evidente que la física correcta sea reproducida para grandes valores de λ .

En la Fig. 12.1, la energía del nivel localizado se ha fijado en $E_d = -0.5$. Se puede observar que sólo hay réplicas a frecuencia negativa. Para $\tilde{E}_d < \epsilon_F = 0$, a temperatura $T = 0$, la ocupación es $n_d = 1$. En el límite de repulsión Coulombiana infinita U , como suponemos, los electrones sólo pueden ser **destruidos en la molécula**. Teniendo en cuenta la representación de la Lehmann de la función de Green [Mahan, 2000] [Fetter and Walecka, 2003], está claro que este hecho implica que la densidad de estados tiene componentes sólo a frecuencias negativas (ver discusión más adelante).

Otro punto interesante es que se espera que el pico principal este ubicado en $\omega = \tilde{E}_d$, es decir, centrado en la energía renormalizada. Para $V_k^\nu = 0$, $\tilde{E}_d = \tilde{E}_d^0 = E_d - \lambda^2/\omega_0$, y su intensidad es proporcional al cuadrado de la superposición entre el estado fundamental de las funciones de onda de fonones para $n_d = 0$ (vacío del operador de fonones a) y $n_d = 1$ (vacío del operador de fonones β). Hay más picos a bajas energías $n\omega_0$ con amplitud reducida por la superposición entre el estado fundamental sin fonones $|0_\beta\rangle$ para el oscilador desplazado y el estado $|n_a\rangle$ con n fonones no desplazados. Como se ve en la Fig. 12.1, la NCA se reproduce muy bien la intensidad y la posición del pico principal. Para λ grande, la posición de este pico se desplaza ligeramente de \tilde{E}_d . El cambio de λ^2/ω_0 se sobreestima en un 5 % para $\lambda = 0.5\omega_0$. Las réplicas están ligeramente desplazadas hacia energías más bajas en NCA, y sus intensidades están subestimadas, pero los resultados siguen siendo semi-cuantitativamente válidos.

Para el resto del capítulo, **los resultados corresponden a $V_K \neq 0$** , es decir, con la hibridación encendida. Es importante señalar que el acoplamiento de electrones y fonones y la hibridación a la banda de conducción están compitiendo. Si el acoplamiento de electrones y fonones es fuerte, la energía del nivel localizado y la posición de equilibrio del oscilador se desplazan y la hibridación se reduce debido a que está dada por la superposición entre las funciones de onda de fonones desplazadas y sin desplazar. En este sentido, la energía ganada por la hibridación es más pequeña y la ganancia de energía elástica se ve favorecida. Sería de esperar para mayor hibridación una situación intermedia, es decir, un corrimiento más pequeño de los fonones y una ganancia de energía de hibridación más grande.

Una vez que se toma en cuenta el acoplamiento a la banda de conducción, varios cambios aparecen en la densidad de estados como se muestra en la Fig. 12.2 para (a) alta y (b) baja temperatura con respecto a la temperatura de Kondo. A altas temperaturas, hay varios picos en la densidad de estados. Si no hubiera fonones, el único pico esperado sería el centrado en \tilde{E}_d . Para el cálculo que se muestra en la figura, la constante de acoplamiento es $\lambda = 0.7$ y el valor de $\tilde{E}_d^0 = E_d - \lambda^2/\omega_0 = -0.5$. El pico que resulta del cálculo numérico está casi centrado en este valor, es decir, $\tilde{E}_d \sim \tilde{E}_d^0$, que es razonable para λ grande. El principal efecto de la hibridación del nivel localizado con la banda de conducción es la vida media finita adquirida. Este tiempo de vida media surge de la posibilidad de un electrón en el estado localizado para escapar hacia la banda de conducción. Este es el origen del ancho 4Δ en el pico a \tilde{E}_d . Se puede observar en la Fig. 12.2 la presencia de réplicas de este pico a frecuencias negativas $\omega = \tilde{E}_d - \omega_0, \tilde{E}_d - 2\omega_0$. Estas réplicas son menos intensas y más difíciles de observar para mayor n . El ensanchamiento del pico correspondiente al nivel localizado como consecuencia de la hibridación con la banda de conducción se observa también en las réplicas. Esto es similar al resultado se muestra en la Fig. 12.1 con los picos ensanchados por la hibridación.

A diferencia de lo que ocurre a $T = 0$, también se esperarían réplicas a frecuencias positivas $\omega = \tilde{E}_d + n\omega_0$. Sin embargo, ya que estas réplicas son producidas por la destrucción de un fonón en el oscilador cargado, su intensidad es proporcional al número de fonones presentes a una dada temperatura

$$\langle n_{ph}(T) \rangle \sim \frac{1}{e^{\omega_0/T} - 1} = e^{-10} = 4 \cdot 10^{-5},$$

para $T = 0.1\omega_0$ que corresponde a la Fig. 12.2(a) y menos aún para (b). Esto es indicativo de que incluso a temperatura finitas no se esperan réplicas a frecuencia positiva. La ausencia de una réplica en $\omega = \tilde{E}_d + \omega_0 = 0.5$ es coherente con esta observación. Como veremos a continuación, las réplicas de frecuencia positiva corresponden a la resonancia Kondo.

De acuerdo con la representación de Lehmann, la densidad de estados está dada por

$$\rho_{d\sigma}(\omega) = \sum_{m,n} |\langle n|d_\sigma|m \rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_n)),$$

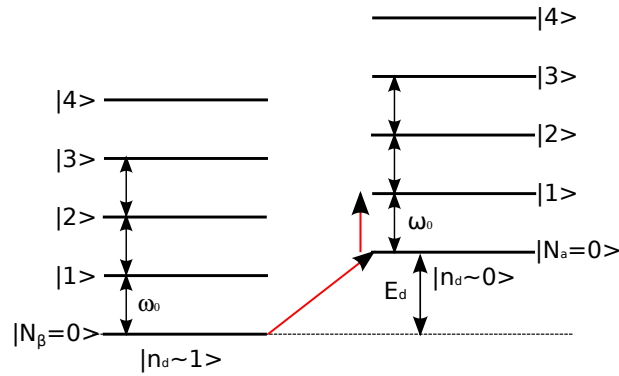


Figura 12.3: Esquema de los autoestados del sistema para $V_k^\nu = 0$.

donde $|n\rangle$, $|m\rangle$ son estados propios de todo el Hamiltoniano. El esquema de niveles no es simple de mostrar ya que el problema es interactuante. Sin embargo, es muy útil representar los posibles estados como en la Fig. 12.3 para $V_K = 0$, con $K = \nu, k$. La ocupación puede ser de $n_d = 0, 1$. Para un acoplamiento dado λ , la energía del nivel localizado se desplaza a \tilde{E}_d . Esta energía corresponde al estado con $n_d = 1$. Por el lado de fonones, si el estado localizado es $|n_d = 0\rangle$, el oscilador no está desplazado y el estado total es $|n_d = 0\rangle \otimes |n_a\rangle$ con energía $n_a\omega_0$. Si el estado localizado está ocupado, la posición de equilibrio del oscilador se desplaza y el estado total es $|n_d = 1\rangle \otimes |n_\beta\rangle$ con energía $\tilde{E}_d + n_\beta\omega_0$. La diferencia de energía sería

$$E_m - E_n = \tilde{E}_d + (n_\beta - n_a)\omega_0.$$

Como se explicó antes, a temperatura cero, uno de los estados es el estado fundamental $|n_d = 1\rangle \otimes |0_\beta\rangle$, con el nivel localizado ocupado y cero fonones en el oscilador desplazado. El operador de destrucción que actúe en este estado lleva a un estado localizado vacío y un número arbitrario de fonones a , $|n_d = 0\rangle \otimes |n_a\rangle$. Esto significa que sólo hay réplicas a frecuencias negativas

$$E_m - E_n = \tilde{E}_d - n_a\omega_0 = -0.5, -1.5, -2.5, \dots$$

A temperatura finita, también es posible tener un número arbitrario de fonones β en el estado de partida. Esto implica que en principio es posible tener réplicas a frecuencias positivas,

$$E_m - E_n = \tilde{E}_d + (n_\beta - n_a)\omega_0 = \dots, 2.5, 1.5, 0.5, -0.5, -1.5, -2.5, \dots$$

La ausencia de la réplica en $\omega = 0.5$ es una clara indicación de que las réplicas a frecuencia positiva sólo se observarían a temperaturas mucho más altas. Esto está de acuerdo con los resultados de la Ref. [Monreal and Martin-Rodero \[2009\]](#) obtenidos usando la ecuación de movimiento para las funciones de Green. Ellos no ven réplicas del pico de transferencia de carga a frecuencias positivas.

Como se muestra en la Fig. 12.2(b), a bajas temperaturas el efecto Kondo se desarrolla y la densidad de estados tiene también la resonancia Kondo

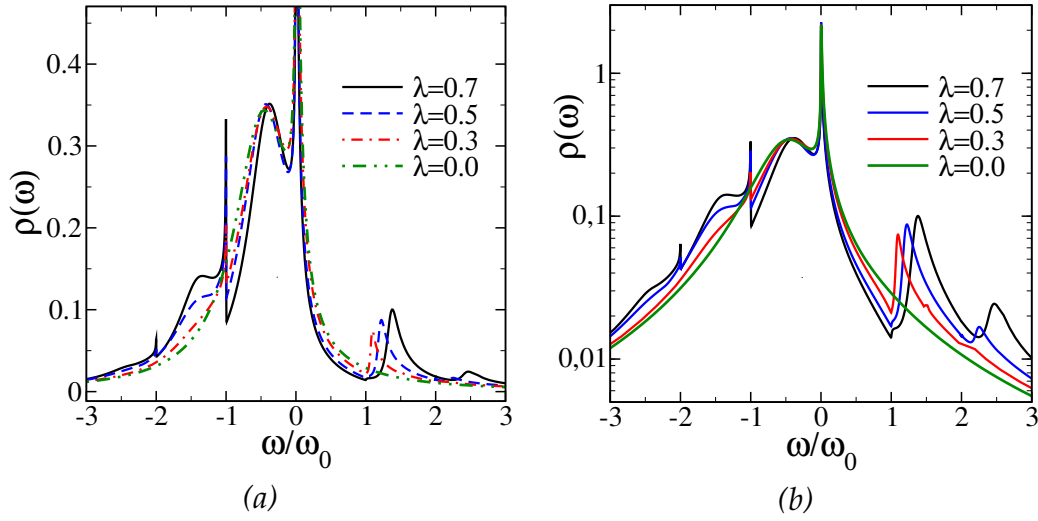


Figura 12.4: Densidad de estados electrónica por espín en función de la frecuencia para temperaturas muy por debajo de la temperatura de Kondo, $\omega_0 = 1$, $\Delta = 0.2\omega_0$, $\tilde{E}_d^0 = -0.5$ y varios valores de λ . El eje vertical es (a) lineal y (b) en escala logarítmica.

cerca de $\omega = \epsilon_F = 0$. En el caso de $\lambda = 0$, solamente habría un pico Kondo estrecho en el nivel de Fermi, y un pico ancho de transferencia de carga cerca de la energía E_d . Es muy interesante notar que para $\lambda \neq 0$, el pico Kondo también posee réplicas de menor intensidad desplazadas a frecuencias negativas por la energía del fonón ω_0 . Los picos a frecuencias positivas se modifican a bajas temperaturas tomando una forma más nítida y un pequeño saltito se observa en $\omega = 1$ que estaba ausente a altas temperaturas. Presento más adelante algunas evidencias para mostrar que los picos a frecuencia positiva corresponden a réplicas de la resonancia Kondo.

El efecto del acoplamiento de electrones y fonones en el régimen de Kondo se puede analizar en la evolución de la densidad de estados con λ que se muestra en la Fig. 12.4. Si se calculan las curvas para los mismos E_d , el corrimiento $-\lambda^2/\omega_0$ resulta diferente para cada acoplamiento y la comparación no tiene sentido (T_K depende exponencialmente de la energía del nivel localizado). Esta es la razón por la que todas las curvas corresponden a los mismos \tilde{E}_d^0 , que está muy cerca de la verdadera (desconocida) energía renormalizada. Ambos, el pico Kondo y el pico de transferencia de carga, se vuelven más estrechos al aumentar λ . Las réplicas son más claras para acoplamiento grande entre electrones y fonones y como se puede observar en la figura, las réplicas del pico Kondo son muy intensas para frecuencias negativas, pero casi insignificantes a frecuencias positivas. Es también evidente que los picos a frecuencia positiva se mueven con λ .

Las **réplicas del pico Kondo** son más sutiles que las que corresponden al pico de transferencia de carga. El pico Kondo se debe a pequeñas fluctuaciones de carga cerca del nivel de Fermi y tiene contribuciones, tanto a frecuencias positivas (creación de un electrón en el nivel localizada d_σ^\dagger) co-

mo negativas (aniquilación). A partir de la representación de Lehmann de la función de Green, la densidad espectral a $\omega = -\omega_0^*$, con ω_0^* cerca de ω_0 , a temperatura cero, viene dada por

$$\rho_{d\sigma}(-\omega_0^*) = \sum_e |\langle e|d_\sigma|g\rangle|^2 \delta(\omega_0^* - \epsilon_e), \quad (12.1)$$

donde los estados aquí son auto-estados del Hamiltoniano completo con electrones y fonones. $|g\rangle$ es el estado fundamental, y $|e\rangle$ son estados excitados con la energía de excitación ϵ_e (la diferencia entre la energía del estado $|e\rangle$ y la energía del estado fundamental E_g).

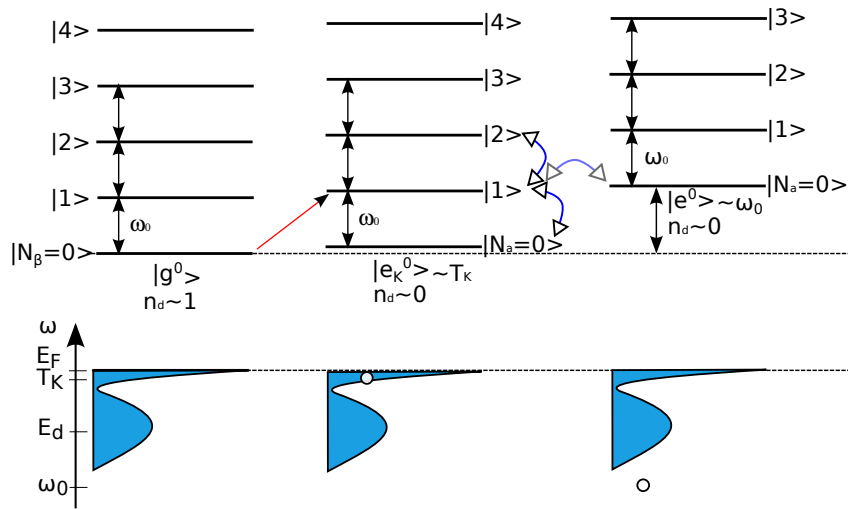


Figura 12.5: Esquema del espectro de excitaciones para $\lambda = 0$ considerando las contribuciones que provienen de la destrucción en el estado fundamental.

Denotamos como $|e_n^0\rangle$, los auto-estados para $\lambda = 0$ con n fonones añadidos al vacío del sistema sin carga ($|0_a\rangle$). $|g_0^0\rangle$ es el estado fundamental para $\lambda = 0$ (véase la Fig. 12.5). Hay que tener en cuenta que la parte electrónica de estos estados es independiente de n , la parte de fonones en la energía es de sólo $n\omega_0$ y $\langle e_n^0|d_\sigma|g_n^0\rangle$ es independiente de n . También introducimos $|e_n^K\rangle$ que son estados $|e_n^0\rangle$ con muy pequeña energía de excitación electrónica y n fonones, que para $n = 0$ son responsables del pico Kondo cuando $\lambda = 0$.

Para λ finito, la interacción electrón-fonón mezcla los estados $|e_n^0\rangle$ y $|g_n^0\rangle$ (que ya no son auto-estados) con aquellos con $n \pm 1$ fonones. En particular, el estado fundamental $|g\rangle$ que para $\lambda = 0$ es $|g_0^0\rangle$ adquiere alguna componente de $|g_1^0\rangle$ (y más pequeñas de $|g_n^0\rangle$). A su vez, los estados $|e\rangle$, que para $\lambda = 0$ son $|e_1^K\rangle$ (con energía cerca de $E_g + \omega_0$) obtienen una cierta cantidad de $|e_0^K\rangle$ después de encender λ . Estas nuevas componentes de los auto-estados conducen a las contribuciones a los elementos de matriz que entran en la Ec. (12.1), que son similares a las del pico de Kondo y aumentan linealmente con λ/ω_0 para λ pequeño.

Además, los estados $|e_0^0\rangle$ con energía cerca de $E_g + \omega_0$ que tienen una gran contribución a la Ec. (12.1) para $\lambda = 0$ se espera tengan una mezcla importante con $|e_1^K\rangle$ para λ finito porque tienen casi la misma energía. Ambos

efectos contribuyen a “trasladar” la estructura electrónica del efecto Kondo contenida en $|e_n^K\rangle$ a la densidad espectral de $\omega \approx -n\omega_0$.

Un razonamiento análogo se puede seguir para $\rho_{d\sigma}(\omega_0^*)$ (frecuencias positivas) cambiando d_σ por d_σ^\dagger en la Ec. (12.1). Para $\omega > \omega_0$, obtenemos estructuras amplias centradas ligeramente por encima de $\omega = n\omega_0$ en una posición que depende de λ (ver Fig. 12.4). Una observación de la primera ($n = 1$), indica un pequeño salto con aumento de la intensidad en $\omega = \omega_0$ y una suave evolución de la intensidad con el aumento de ω .

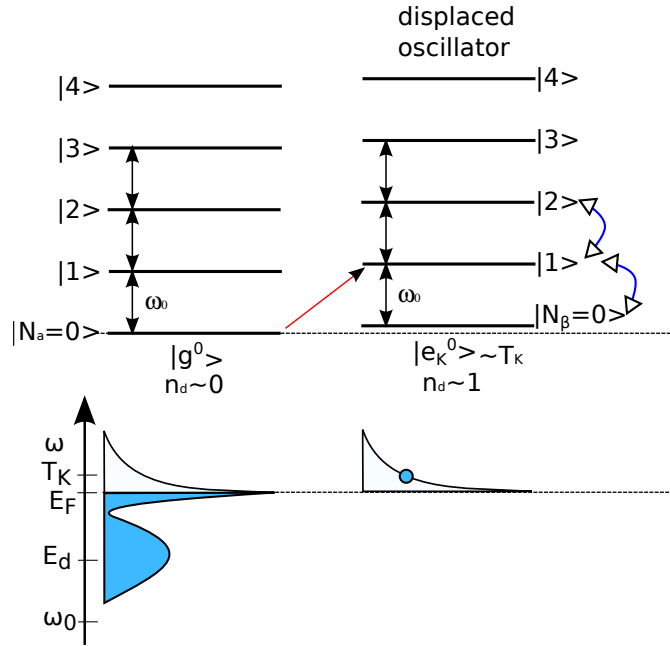


Figura 12.6: Esquema del espectro de excitaciones para $\lambda = 0$ considerando la creación en el estado fundamental.

Las réplicas se esperarían en $n\omega_0$. El cambio de posición con respecto a ω_0 parece estar relacionado con una pérdida de la ganancia de energía ΔE [ver la Ec. (11.6) | ver la Fig. 12.6] en la mayoría de los estados excitados implicados en la descomposición espectral de $d_\sigma^\dagger|g\rangle$. Es importante notar que los estados excitados $|e_K^0\rangle$ corresponden al oscilador desplazado. El ensanchamiento del pico parece estar relacionada en la incertidumbre en la posición de equilibrio del oscilador dado que n_d no está bien definida.

La posición de los picos a frecuencia positiva no cambia con E_d como podría esperarse para una característica relacionada con el pico de transferencia de carga. Esto se muestra en la Fig. 12.7(a). En la figura, λ está fijo y \tilde{E}_d^0 toma los valores -0.7 (en rojo) y -0.5 (en negro). De la figura, también se observa que como cuando E_d disminuye, el peso de este pico disminuye. Esto es lo que se espera para un pico Kondo, ya que su peso total es proporcional a T_K , la que disminuye con la disminución de E_d .

La evolución con la temperatura de las réplicas a frecuencia positiva (véase la Fig. 12.7(b)) también sugiere que están relacionadas con la resonancia Kondo, ya que en contraste con el pico de transferencia de carga,

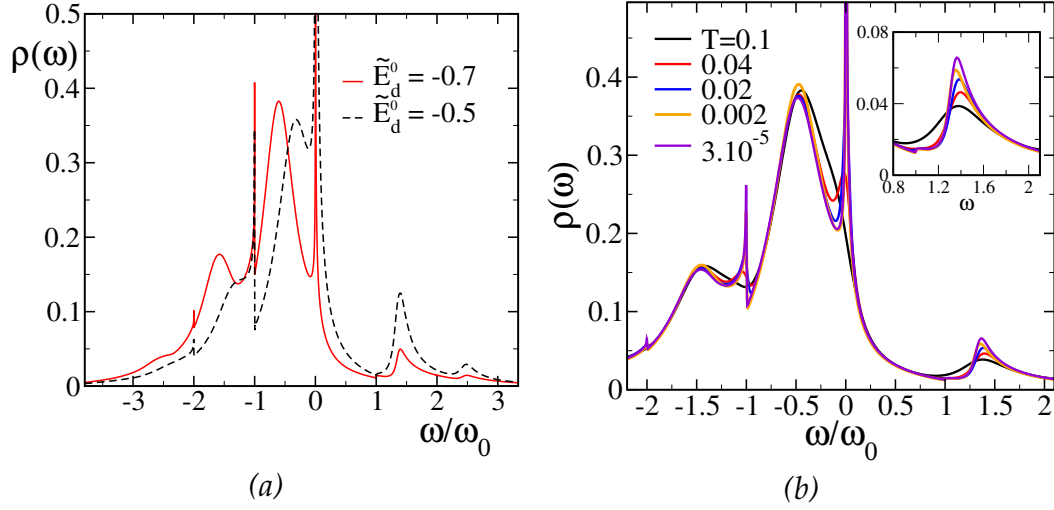


Figura 12.7: Densidad espectral electrónica por espín en función de la frecuencia para $\Delta = 0.2\omega_0$, $\lambda = 0.7$, (a) para dos valores de \tilde{E}_d^0 y una temperatura muy por debajo de la temperatura de Kondo; (b) para $\tilde{E}_d^0 = -0.5$ y varias temperaturas. El recuadro interior muestra un detalle del pico cerca de $\omega = \omega_0$.

disminuyen en intensidad a medida que aumenta la temperatura. Como es conocido para el caso con $\lambda = 0$, existe una fuerte dependencia del pico a la energía de Fermi (el pico Kondo) con la temperatura a $T \sim T_K$. Definimos T_K como el ancho mitad a la mitad del máximo del pico Kondo a temperatura cero. En el *recuadro interior*, se puede observar una dependencia similar de los picos satélite cerca de $\omega = \omega_0$, lo que sugiere que estos picos son réplicas del apantallamiento del momento magnético Kondo a baja energía combinado con el efecto de un fonón virtual. Por ejemplo, mientras que la intensidad del pico de transferencia de carga cerca de \tilde{E}_d o su réplica en $\tilde{E}_d - \omega_0$ apenas cambian para temperaturas del orden de T_K , los otros picos pierden intensidad fuertemente (para $\omega \sim 1.34\omega_0$) o desaparecen (para $\omega \sim 0, -\omega_0, -2\omega_0$) a $T = 0.1 > T_K \approx 0.01\omega_0$.

12.2. La dependencia de T_K con el acoplamiento electrón-fonón.

En presencia del acoplamiento electrón-fonón λ , para un nivel localizado renormalizado fijo \tilde{E}_d , se espera que T_K disminuya al aumentar λ , debido a la renormalización de la hibridación V . Sin embargo, no se espera una disminución exponencial (como predice el desacoplamiento simple de electrones y fonones) [Hewson and Meyer, 2002].

Con el fin de analizar esto apropiadamente es importante tener bien definido \tilde{E}_d . En la Fig. 12.8(a) se muestran los cálculos manteniendo fijo $\tilde{E}_d^0 = E_d - \lambda^2/\omega_0$ para diferentes valores de λ . El *recuadro interior* de la fi-

gura muestra los resultados para T_K en función de λ en esta condición de \tilde{E}_d^0 fijo (más precisamente, $2T_K$ vs λ). Como en la Ref. [Monreal and Martin-Rodero \[2009\]](#) obtenemos una disminución moderada de T_K con el aumento de la interacción entre electrones y fonones λ . Sin embargo, en nuestro caso encontramos una meseta entre $0.6 < \lambda/\omega_0 < 0.7$, que a primera vista parece sorprendente. Nosotros atribuimos este efecto al hecho de que mientras que \tilde{E}_d^0 es constante, el nivel efectivo real \tilde{E}_d aumenta con λ en este intervalo y hay una compensación de este efecto (que tiende a aumentar T_K) con la disminución monótona de T_K con λ para \tilde{E}_d fijo.

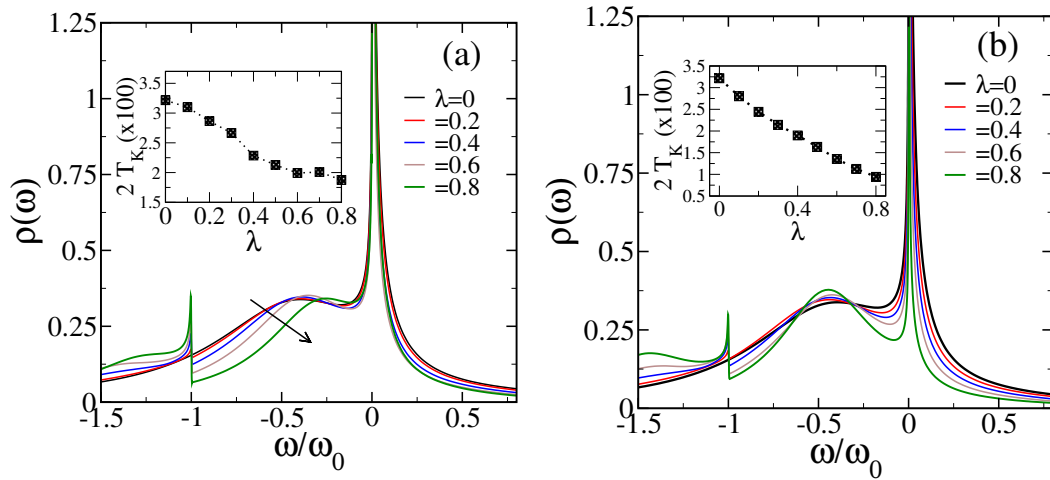


Figura 12.8: Densidad de estados electrónica para varios valores de λ , con $\omega_0 = 1$, $\Delta = 0.2$ y (a) $\tilde{E}_d^0 = -0.5$, (b) $\tilde{E}_d = -0.5$ mantenido constante. Los recuadros interiores muestran el ancho del pico cerca de $\omega = 0$ (dos veces la temperatura de Kondo T_K) como una función de λ .

Uno de los argumentos es que el máximo del pico de transferencia de carga cerca de $\omega \approx -0.4\omega_0$ para $\lambda = 0$ en la Fig. 12.8 se mueve hacia la derecha a medida que λ aumenta. Vale la pena notar que el desplazamiento ordinario hacia arriba del nivel localizado renormalizado $(\Delta/\pi)\ln(D/\Delta)$ calculado con escalo *poor-man* [\[Haldane, 1978a\]](#) conduce a un cambio en la dirección opuesta debido a que la ancho efectivo del nivel resonante disminuye.

En la Fig. 12.9(a) mostramos $\Delta E_d = \tilde{E}_d - \tilde{E}_d^0$ en función de λ con E_d calculado variacionalmente como se discute en la Sec. 11.2.3. Con respecto a los parámetros de la Fig. 12.8, hemos multiplicado Δ por un factor de 2, ya que conduce aproximadamente a la ocupación correcta del nivel localizado en comparación con los resultados del NRG [\[Roura-Bas et al., 2012b\]](#). Aunque el cálculo variacional puede proporcionar sólo los resultados cualitativos, se puede observar que predice el incremento de ΔE_d con λ cerca de $\lambda/\omega_0 = 0.5$ y una saturación para mayor λ , lo cual es consistente con la existencia de la meseta en el *recuadro interior* de la Fig. 12.8(a). Otra prueba del cambio en ΔE_d como causante de esta meseta es proporcionado por la dependen-

cia de la ocupación del nivel localizado con λ (calculado con NCA). Esto se muestra en la Fig. 12.9 (b) y el comportamiento recuerda al de ΔE_d , con un máximo cerca de $\lambda/\omega_0 = 0.5$.

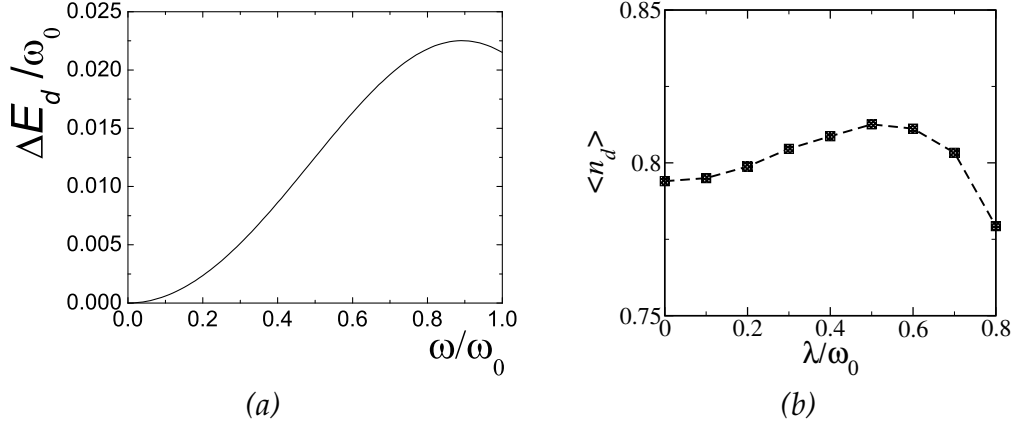


Figura 12.9: (a) Diferencia entre el nivel localizado renormalizado y el sin renormalizar y (b) la ocupación del nivel localizado como función del acoplamiento electrón-fonón para $\omega_0 = 1$, $\Delta = 0.4$ y $\tilde{E}_d^0 = -0.5$.

Como análisis final de esta situación, hemos repetido varios cálculos NCA para cada valor de la interacción electrón-fonón λ , cambiando el nivel desnudo E_d de tal manera que el máximo del pico de transferencia de carga (cerca de $\omega \approx -0.4\omega_0$ en la Fig. 12.8(a) para $\lambda = 0$) se encuentre en la misma posición, con un error menor que una fracción de T_K . Este procedimiento toma mucho tiempo, pero ya que la NCA es muy superior que el cálculo variacional, nos asegura que estamos trabajando con el nivel localizada renormalizado \tilde{E}_d constante con una precisión razonable. Los resultados se muestran en la Fig. 12.8(b). En contraste con la Fig. 12.8(a), se puede observar que la posición del pico de transferencia de carga permanece constante, mientras que se estrecha cuando λ aumenta. Ahora obtenemos una disminución monótona de T_K con λ como se espera. También la ocupación del nivel localizado tiene un incremento monótono con λ de 0.79 para $\lambda = 0$ a 0.87 para $\lambda = 0.8$.

12.3. Densidad espectral y conductancia fuera de equilibrio

En esta sección se analizan las propiedades de transporte de la molécula vibrante modelada con un Hamiltoniano de Anderson-Holstein. En este sistema, dado el hecho de que los acoplamientos a izquierda y derecha son proporcionales, para voltajes pequeños las propiedades de transporte están determinadas esencialmente por la densidad de estados electrónica. Por lo

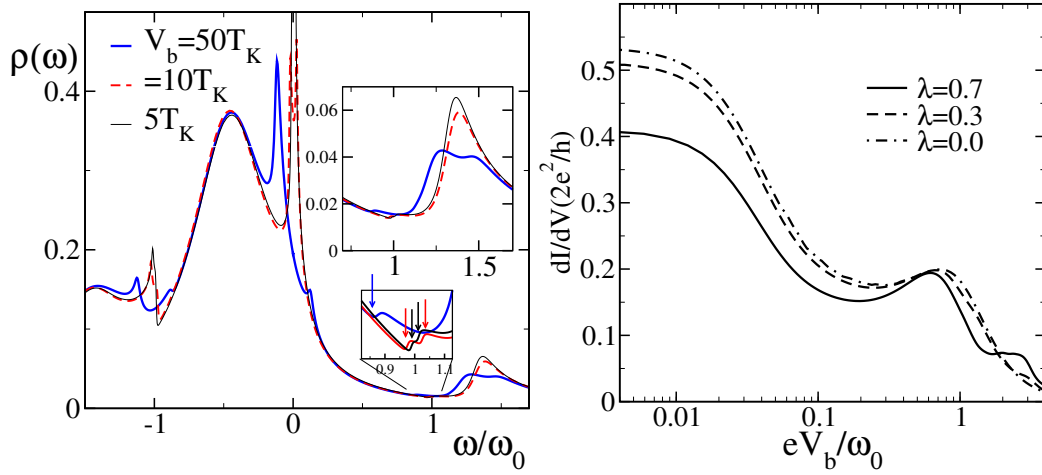


Figura 12.10: (a) Densidad de estados electrónica por espín como función de la frecuencia ω para $\Delta = 0.2$, $\lambda = 0.7$, $\tilde{E}_d^0 = -0.3$, $T = 0.05 T_K$ y varios voltajes. El recuadro interior muestra detalles para $\omega \sim \omega_0$. Las flechas indican los pequeños escalones a la izquierda del pico cerca de $\omega \sim 1.35\omega_0$. (b) Conductancia en función del voltaje aplicado para $\omega_0 = 1$, $T = 0.02$, $\tilde{E}_d^0 = -0.6$, $\Delta = 0.2$ y varios valores de λ .

tanto, todo el análisis de la Sec. 12.1 es muy útil para entender la conductancia diferencial. En la Fig. 12.10(a) se presenta la evolución de $\rho_{d\sigma}(\omega)$ con el voltaje aplicado V_b . Además del desdoblamiento conocido del pico Kondo con V_b , [Wingreen and Meir, 1994] la réplica del pico Kondo cerca de $\omega = -\omega_0$ también divide, un hecho que apoya de nuevo la noción de que estos picos satélite están relacionados con el pico Kondo en la energía de Fermi. Para $\omega \approx 1.35\omega_0$, también es posible observar un desdoblamiento pero sólo para tensiones suficientemente grande para que eV_b supere el ancho intrínseco del pico. El recuadro interior muestra que el escalón que aparece en $\omega = \omega_0$, también está dividido para tensión finita, y la división es claramente visible ya para pequeños voltajes, del orden de unas cuantas veces T_K/e .

La conductancia $G = dI/dV_b$, donde I es la corriente como función de una tensión aplicada V_b , se muestra en la Fig. 12.10(b) para una temperatura ligeramente por encima de la temperatura de Kondo y varios valores de la interacción electrón-fonón. Además del pico Kondo en $V_b = 0$, y del pico de transferencia de carga cerca de $V_b = \pm\tilde{E}_d$, réplicas del pico Kondo con menor intensidad aparecen para $eV_b = \pm 2\omega_0$ reflejando los procesos inelásticos en el que se crea o se destruye un fonón. Dado que la curva es simétrica con respecto a un cambio de signo de la tensión [$G(-V_b) = G(V_b)$] se muestran sólo valores positivos de V_b . En general, se esperan nuevos picos a $eV_b = \pm 2n\omega_0$ con $n > 1$, como se ha observado experimentalmente [Zhitenev et al., 2002]. Estos son difícil de reproducir dentro de la NCA debido a las limitaciones del procedimiento numérico a temperaturas muy bajas.

En los experimentos de transporte a través de moléculas, los acoplamientos a los conductores Γ_ν son muy asimétricos en general. En la Fig. 12.11 la conductancia de no equilibrio se muestra en un caso en el que $\Gamma_L = 30\Gamma_R$ (ti-

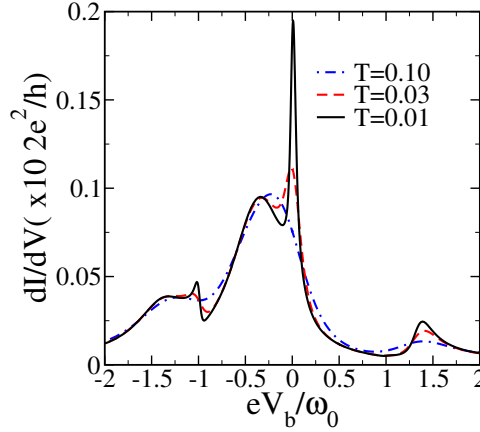


Figura 12.11: Conductancia como una función del voltaje aplicado para acoplamientos y caída de tensión asimétricos (véase el texto). Los parámetros son $\omega_0 = 1$, $T = 0.02$, $\tilde{E}_d^0 = -0.6$, $\Delta = 0.2$ y $\lambda = 0.7$.

pico de los experimentos con puntos cuánticos en C_{60} [Florens et al., 2011]), manteniendo $\Gamma_R + \Gamma_L = 2\Delta$, y donde se toma la caída de tensión inversamente proporcional al correspondiente Γ_ν : $\mu_L = (1/31)V_b$, $\mu_R = (-30/31)V_b$. En este caso, la densidad de estados en la molécula para la tensión aplicada finita V_b es similar a aquella en la que la molécula está en equilibrio con el cable cuyo acoplamiento es más grande, y no resulta fuertemente modificada por V_b . Dado que la mayoría de la caída de tensión ocurre entre el sistema y el otro cable, la situación es similar a la de microscopía de efecto túnel de barrido (STM), en los que la densidad espectral se ve poco afectado por el cable menos acoplado (o punta STM) y la densidad espectral se refleja en la conductancia diferencial $G(V_b)$. Por lo tanto, la conductancia resultante es cualitativamente similar a la densidad espectral en función de la frecuencia, que se muestra en la Fig. 12.7(b).

12.4. Discusión y conclusiones

En esta primera etapa hemos calculado la densidad de estados y la conductancia de no equilibrio del modelo de Holstein-Anderson, que describe una molécula o un punto cuántico con un único nivel localizado (magnético) y un único modo de fonones relevante de frecuencia ω_0 acoplado a la ocupación del nivel localizado.

La densidad de estados muestra la interrelación entre la física Kondo habitual en la que el momento magnético es apantallado por los electrones de conducción a bajas temperaturas, y las vibraciones. Como consecuencia de esta última, aparecen picos adicionales en la densidad de estados en las frecuencias cerca de múltiplos de $\pm\omega_0$, que reflejan la física tanto del apantallamiento Kondo como el efecto de las vibraciones. Sin embargo, la naturaleza de estas réplicas del efecto Kondo, su posición y ancho exacto son complicados de entender completamente.

La escala de energía característica T_K disminuye ligeramente (no en una forma exponencial) con el aumento del acoplamiento electrón-fonón λ para el nivel de energía efectivo \tilde{E}_d fijo. Encontramos que este nivel efectivo \tilde{E}_d es ligeramente mayor que $\tilde{E}_d^0 = E_d - \lambda^2/\omega_0$ y esta diferencia tiene consecuencias importantes por ejemplo, cuando se comparan las temperaturas de Kondo para diferentes λ .

La conductancia a través del sistema a temperaturas bajas muestra no sólo un pico central a tensiones pequeñas V_b debido al pico Kondo, sino también picos adicionales que corresponden a procesos inelásticos que implican la creación y destrucción de fonones.

Hemos limitado nuestros cálculos a $\lambda < 0.7$. No esperamos que la NCA sea válida para grandes valores de λ . Para λ chico la NCA es por supuesto válida, ya que se reduce a segundo orden en teoría de perturbaciones en λ . Para el régimen polarónico extremo $\lambda \gg 1$ en equilibrio, se deben usar otras técnicas, [Cornaglia et al., 2007] [Cornaglia et al., 2004] [Hewson and Meyer, 2002] [Monreal and Martin-Rodero, 2009] como NRG. El problema de no equilibrio es más difícil y existen algunos enfoques alternativos, como se explica en la introducción.

Después de este análisis para un solo doblete, el siguiente capítulo presentamos nuestro trabajo en curso sobre el modelo de Aligia en presencia de fonones.

Interferencia y fonones en sistemas interactuantes

- 13.1 Acoplamiento electrón-fonón en el modelo de Aligia.
- 13.2 El límite SU(2) de un nivel en presencia de fonones.
- 13.3 El límite SU(4) en presencia de fonones.
- 13.4 Conclusiones parciales.

Este capítulo es un posible resumen del trabajo presentado en esta tesis. Todavía es un trabajo en curso. Presento un estudio del efecto de los fonones en un sistema interactuante que muestra fenómenos de interferencia.

Los efectos de interferencia en las propiedades de transporte de los sistemas nanoscópicos pueden describirse con el *modelo de Aligia* que se introduce en el **Capítulo 5** y cuyos límites se discuten en equilibrio en el **Capítulo 6** y fuera de equilibrio en el **Capítulo 7**. El modelo considera dos dobletes localizados con energías E_1 y E_2 que están acoplados a un único par de cables izquierda-derecha. Tres de los acoplamientos V_ν^i , con $i = 1, 2$ y $\nu = L, R$ pueden hacerse reales. La fase restante ϕ puede ser relacionada con la diferencia de fase en el transporte de izquierda a derecha entre los dos estados y da cuenta de los posibles efectos de interferencia. En el régimen de Kondo, cuando las energías de los dobletes están muy por debajo del nivel de Fermi, nuestro modelo permite estudiar la interrelación entre la interferencia y la física de Kondo, que no ha sido incluida en otros tratamientos [Härtle et al., 2011] pero que se ha demostrado desempeñar un papel [Park et al., 2002] [Liang et al., 2002] [Roch et al., 2008] [Parks et al., 2010].

En el caso de dobletes degenerados $E_1 = E_2$ y acoplamientos iguales $|V_L^1| = |V_L^2| = |V_R^1| = |V_R^2| = V$, el modelo cuenta con más simetría. En el caso de $\phi = \pi$, la simetría es SU(4) y es posible estudiar el efecto Kondo SU(4) en equilibrio [Tosi et al., 2012a]. Las propiedades de transporte son muy interesantes como consecuencia de la fase π que conduce a interferencia destructiva total [Roura-Bas et al., 2011]. Bajo el efecto de un campo δ que rompe la simetría cambiando la energía de uno de los dobletes con respecto al otro $E_2 = E_1 + \delta$, la simetría del modelo se reduce de SU(4) a SU(2) de un nivel y las propiedades de transporte se pueden estudiar en la transición suave de $\delta = 0 \rightarrow \infty$. Para δ finito, la temperatura de Kondo está fuertemente reducida respecto de $T_K(SU(4))$ y hay picos satélite en la densidad

de estados en correspondencia con posibles procesos inelásticos. También hemos aplicado el modelo para estudiar el transporte a través de una molécula de benceno en el régimen de Kondo. Si los cables están conectados en la posición *para* (180 grados) la fase es $\phi = 0$ y el modelo se reduce a un único doblete efectivo con simetría SU(2). Si están conectados en posición *meta* (120 grados) la fase es $2\pi/3$ y hay interferencia destructiva parcial. El comportamiento es similar al caso de SU(4) con un desdoblamiento efectivo $\tilde{\delta}$. Este desdoblamiento es producido por la mezcla de los dobletes a través de la fase compleja (que introduce acoplamientos no diagonales). Hemos observado picos secundarios en la conductancia diferencial que serían observables en un experimento [Roura-Bas et al., 2012a].

En las moléculas, las vibraciones han demostrado afectar las propiedades de transporte [Zhitenev et al., 2002] [Kim et al., 2011] [Fernández-Torrente et al., 2008]. La pregunta que nos gustaría tratar de responder es cuál es el efecto de los fonones en los fenómenos de interferencia. En las moléculas, la interferencia se ha investigado experimentalmente [Guédon et al., 2012] [Vazquez et al., 2012] y se ha demostrado indirectamente que los fonones inducen decoherencia [Ballmann et al., 2012]. Nosotros analizamos el efecto de los fonones en nuestro modelo de interferencia.

La descripción del transporte a través de un sistema interactuante que presenta efecto Kondo en presencia de fonones es un problema difícil por sí mismo. Calculamos las propiedades de transporte de no equilibrio de moléculas vibrantes en el régimen de Kondo descritas por un único doblete acoplado con los conductores de izquierda-derecha y un único modo de vibración relevante [Roura-Bas et al., 2013]. Presenté los resultados en el **Capítulo 12**. Los puntos más importantes que se encuentran son la dependencia suave de la temperatura de Kondo T_K con el acoplamiento electrón-fonón λ y la presencia de réplicas del pico Kondo en la conductancia diferencial. Este estudio anterior es la base para entender los resultados de este capítulo en el que los fonones son incluidos en nuestro modelo de interferencia.

13.1. Acoplamiento electrón-fonón en el modelo de Aligia

En el caso más general representado en la Fig. 13.1, puede haber varios modos de vibración acoplados a los dos dobletes que se consideran en nuestro modelo de interferencia.

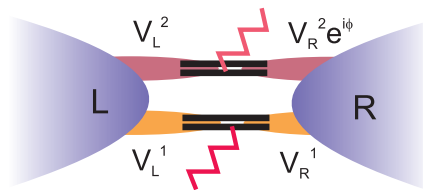


Figura 13.1: Representación del modelo de Aligia en presencia de fonones.

En este caso, el Hamiltoniano es

$$H_{\text{Aligia}} = \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \sum_{\alpha} \Omega_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha} + \sum_{i \sigma} E_i d_{i \sigma}^\dagger d_{i \sigma} + \text{Coulomb repulsion} \\ + \sum_{i \nu k \sigma} (V_{\nu}^i d_{i \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i \alpha \sigma} \lambda_{i \alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^\dagger) d_{i \sigma}^\dagger d_{i \sigma}, \quad (13.1)$$

donde $c_{\nu k \sigma}^\dagger$ ($c_{\nu k \sigma}$) es el operador de creación (destrucción) de un electrón de conducción con momento k y espín σ en el cable $\nu = L, R$, $d_{i \sigma}^\dagger$ ($d_{i \sigma}$) es el operador de creación (destrucción) de un electrón en el doblete i con energía E_i y V_{ν}^i es el coeficiente de acoplamiento del nivel i con el cable ν . Trabajamos en el límite de gran repulsión de Coulomb en el que no se permite más de un electrón en total en cada momento. El operador a_{α}^\dagger (a_{α}) es el operador de creación (destrucción) de los fonones en el modo α con frecuencia ω_{α} . Las coordenadas x_{α} de los modos de vibración se acoplan a la carga total en el nivel localizado i con intensidad $\lambda_{i \alpha}$.

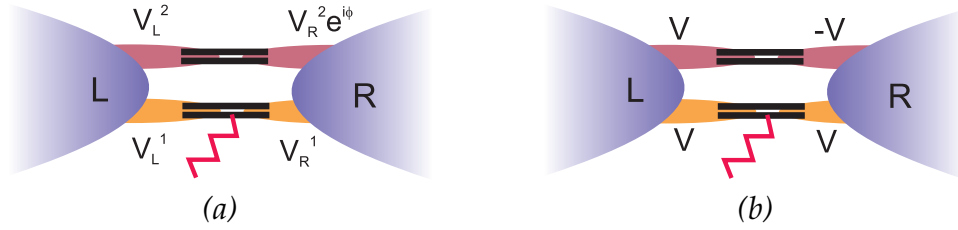


Figura 13.2: Representación del modelo de Aligia en presencia de fonones considerando sólo un modo y (b) en el caso de $\phi = \pi$.

De acuerdo con la simetría de los estados, es común encontrar un modo de vibración que se acopla preferentemente. Nosotros consideramos este caso de un modo relevante de frecuencia ω_0 . Además, estamos interesados en el caso en que esta vibración se acopla con uno de los niveles, creando una diferencia entre ellos. En este caso, el modelo se puede representar como en la Fig. 13.2(a) y el Hamiltoniano resulta

$$H = \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \omega_0 a^\dagger a + \sum_{i \sigma} E_i d_{i \sigma}^\dagger d_{i \sigma} + \text{Coulomb repulsion} \\ + \sum_{i \nu k \sigma} (V_{\nu}^i d_{i \sigma}^\dagger c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{\sigma} \lambda (a + a^\dagger) d_{1 \sigma}^\dagger d_{1 \sigma}. \quad (13.2)$$

Nosotros usamos la aproximación *non-crossing* (NCA) para resolver de forma numérica este Hamiltoniano y calcular las funciones de Green y la corriente usando la fórmula de Meir y Wingreen ¹[Meir and Wingreen, 1992]. El tratamiento del acoplamiento electrón-fonón dentro de la NCA se discute en el **Apéndice E** y los detalles de la NCA para el problema de Kondo se pueden encontrar en la Sec. A.5 del **Apéndice A** y los **Apéndices B y C**.

¹Mirar el **Capítulo 3** y el **Apéndice A**.

Presento en este capítulo resultados que corresponden a las propiedades de equilibrio del límite SU(4) en presencia de un modo de vibración (véase la Fig. 13.2(b)). Este límite para la parte electrónica se encuentra para $E_1 = E_2 = E_d$ y $V_L^1 = V_R^1 = V_L^2 = |V_R^2| = V$ con fase π . Para comparar, también he incluido los resultados para el límite de un doblete que se puede obtener haciendo E_2 muy grande. El modelo cuenta con simetría SU(2) en este límite y se puede comparar con los resultados presentados el último capítulo.

13.2. El límite SU(2) en presencia de fonones

Para los cálculos hemos tomado $2\Gamma_{ii}^\nu = 1$ como nuestra unidad de energía, donde para una densidad de estados constante $\rho_0 = \frac{1}{2D}$ de los electrones de conducción extendida entre $-D$ y D , $\Gamma_{ij}^\nu = 2\pi\rho_0 V_\nu^i (V_\nu^j)^*$. Esto significa que $\Delta \equiv \Gamma_{ii}^\nu = \frac{\pi}{D} V^2$, con Δ el ancho del nivel resonante en ausencia de interacciones.

En el límite de $E_2 \rightarrow \infty$ nuestro modelo de interferencia se reduce a un modelo de Anderson SU(2) de un nivel. Hemos tomado $D = 10$ y $E_1 = -4$. La densidad de estados resultante en ausencia de acoplamiento electrón-fonón, $\lambda = 0$, se muestra en la Fig. 13.3(a). A altas temperaturas (curva negra) sólo hay un pico ancho centrado en $\omega = E_d$ que corresponde al pico de transferencia de carga. El ancho del pico es 4Δ . A bajas temperaturas $T = 5 \cdot 10^{-6}$, hay otro pico cerca de $\omega = \epsilon_F = 0$, que corresponde a la resonancia Kondo. La mitad del ancho del pico está relacionada con la temperatura de Kondo $T_K(SU(2)) = 1.5 \cdot 10^{-5}$.

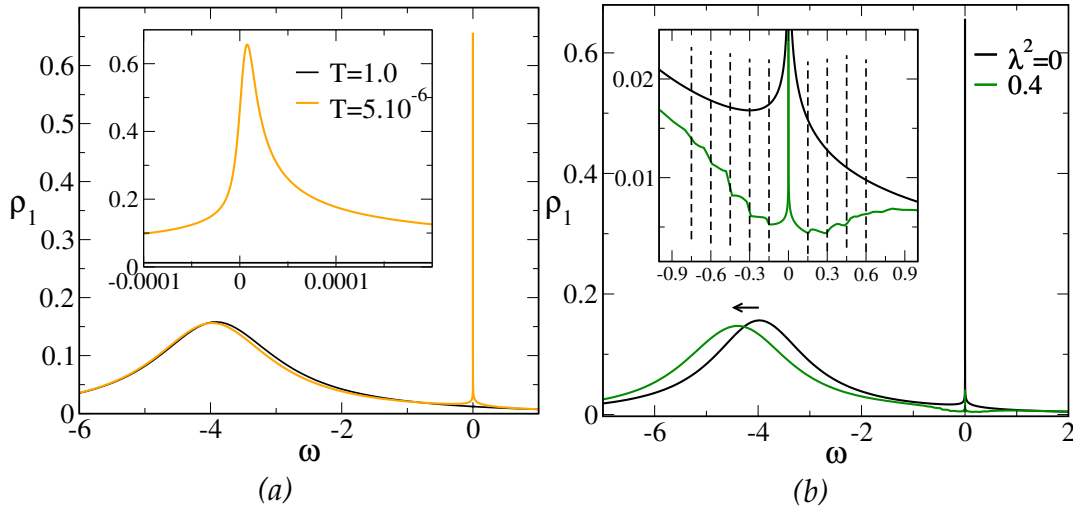


Figura 13.3: Densidad de estados electrónica para el estado $|1\sigma\rangle$ en el límite de $E_2 \gg E_1$ con (a) $\lambda = 0$ y (b) $\lambda^2 = 0.4$ a $T = 5 \cdot 10^{-6}$. Parámetros: $E_1 = -4$, $2\Delta = 1$, $D = 10$, $\omega_0 = 0.15$.

Cuando los fonones entran en el juego, la densidad de estados resulta

fuertemente modificada en el régimen de Kondo. El resultado para $\omega_0 = 0.15$ y $\lambda^2 = 0.4$ se muestra en la Fig. 13.3(b) a temperaturas muy bajas. Se puede observar que el máximo del pico de transferencia de carga se desplaza $\Delta E_d = \tilde{E}_d - E_d = -0.43$ como consecuencia del acoplamiento de electrones y fonones. Además, la resonancia Kondo es más estrecha y hay réplicas en múltiplos enteros positivos y negativos de ω_0 . El estrechamiento es un reflejo de la disminución de la temperatura de Kondo con λ y las réplicas se originan por la creación y destrucción de fonones como se explica en el **Capítulo 12**. En comparación con los resultados anteriores, es interesante notar que aquí está muy claro que las réplicas corresponden a la resonancia Kondo gracias a la separación de las escalas de energía. Esto apoya los argumentos dados el último capítulo.

La evolución de la densidad de los estados con el acoplamiento electrón-fonón λ se muestra en la Fig. 13.4 para el mismo $E_d = -4$.

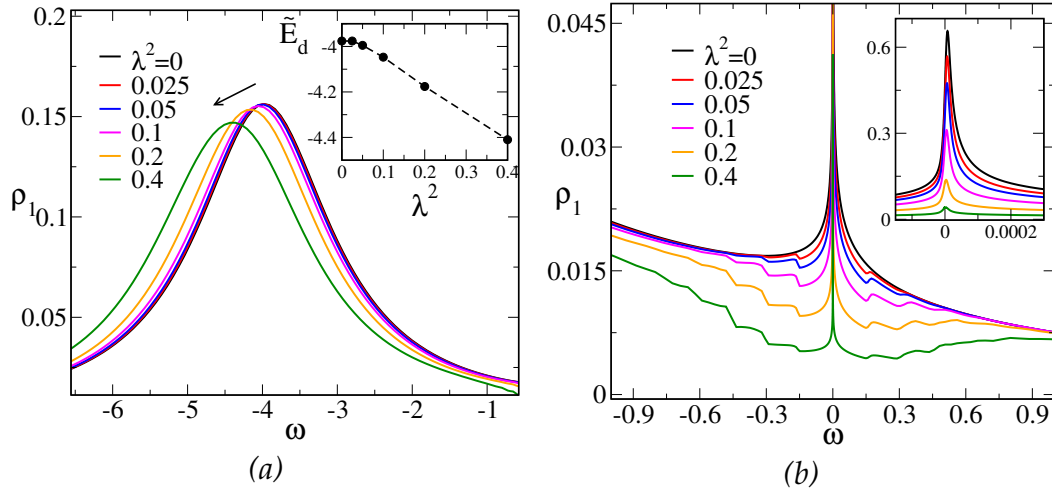


Figura 13.4: Evolución del (a) pico de transferencia de carga y (b) la resonancia Kondo con λ en la densidad de estados electrónica del estado $|1\sigma\rangle$ en el límite de $E_2 \gg E_1$. Parámetros: $E_1 = -4$, $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$, $D = 10$, $T = 5 \cdot 10^{-6}$. Recuadro interior de (a): Posición del pico de transferencia de carga en función de λ^2 . Recuadro interior de (b) Evolución del ancho del pico de Kondo con λ .

En la Fig. 13.4(a), se puede observar cómo el pico de transferencia de carga se desplaza ligeramente hacia energías más bajas a medida que λ aumenta. La dependencia es lineal con λ^2 como se muestra en el *recuadro interior*. La evolución de la resonancia Kondo se muestra en (b). El pico se reduce con el aumento de λ y aparecen réplicas en $\pm n\omega_0$. Es interesante que para estos valores de $\lambda = 0.158, 0.224, 0.316, 0.447, 0.632$, la posición de las réplicas en frecuencia positiva no depende de λ , como se observó en el **Capítulo 12**.

Usando los corrimientos representados en el *recuadro interior* de la Fig. 13.4(a), el efecto de los fonones se puede separar de la variación intrínseca en la temperatura de Kondo debido al cambio de E_d . En la Fig. 13.5 los resultados para los mismos valores de λ se muestran manteniendo $\tilde{E}_d = -4$.

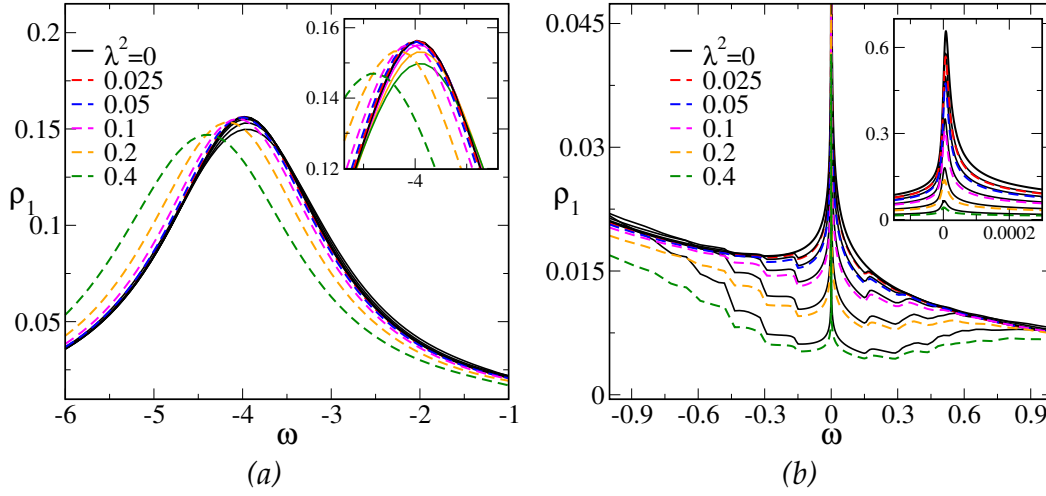


Figura 13.5: Evolución del (a) pico de transferencia de carga y (b) la resonancia Kondo con λ en la densidad de estados electrónica del estado $|1\sigma\rangle$ fijando $\tilde{E}_d = -4$ (líneas continuas) en comparación con mantener fijo E_d (líneas discontinuas). Parámetros: $E_d = -4$, $E_2 \gg E_1$, $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$, $D = 10$, $T = 5 \cdot 10^{-6}$. Recuadro interior de (a): Zoom a la posición del pico de transferencia de carga. Recuadro interior de (b): Evolución del ancho del pico de Kondo con λ .

En (a) el pico de transferencia de carga está claramente fijo en la misma posición (aparte de pequeñas correcciones) y en (b) la resonancia Kondo es más ancha para todos los valores de λ y las replicas son ligeramente más intensas. El estrechamiento restante de la resonancia Kondo con λ se debe exclusivamente al acoplamiento electrón-fonón.

13.3. El límite SU(4) en presencia de fonones

En el límite SU(4), $E_1 = E_2$ y $\phi = \pi$. Los dos dobletes están degenerados, y considerando además la degeneración de espín, hay un total de cuatro estados posibles $|i\sigma\rangle$ que están degenerados e igualmente poblados a bajas temperaturas. Puesto que hay más procesos posibles de “inversión de espín”, el efecto Kondo es más robusto en comparación con el caso SU(2). La densidad de estados en ausencia de fonones se muestra en la Fig. 13.6(a). El resultado del límite SU(2) (líneas de trazos roja) se ha incluido también. La resonancia Kondo es mucho más ancha en el SU(4) debido a la mayor temperatura de Kondo $T_K(SU(4)) = 0.012$ y el pico no está centrada en el nivel de Fermi, sino desplazado hacia la derecha. Esto es coherente con la regla de suma de Friedel (que fija la mitad del valor encontrado en el caso SU(2) para la densidad de estados en el nivel de Fermi a temperatura cero) y se debe a que la mayor degeneración conduce a una ocupación media parcial $\langle n_{i\sigma} \rangle \approx 0.25$ para cada estado. Esto es consistente con la pérdida de peso espectral en el pico de transferencia de carga.

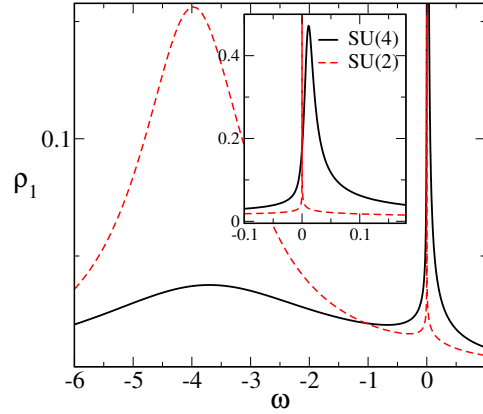


Figura 13.6: Densidad de estados electrónica para el estado $|1\sigma\rangle$ en el límite de simetría SU(4) para $\lambda = 0$ a $T = 5 \cdot 10^{-3}$. Parámetros: $E_1 = E_2 = -4$, $2\Delta = 1$, $D = 10$, $\omega_0 = 0.15$. La densidad de estados en el límite de simetría SU(2) a $T = 5 \cdot 10^{-6}$ también se muestra por comparación. El recuadro interior es un zoom de la resonancia Kondo.

Algunos resultados del acoplamiento electrón-fonón pueden predecirse a la luz del análisis de la sección anterior. Si el acoplamiento al fonón conduce a una renormalización de la energía \tilde{E}_d debido a un cambio ΔE_d , sería de esperar que en presencia de fonones que se acoplan al doblete 1, la degeneración se pierda. Hay un desdoblamiento finito $E_2 = E_1 + \delta$ entre los dobletes. La ruptura de la simetría SU(4) por un campo δ se discutió en el **Capítulo 6**. Para δ finito la temperatura de Kondo se reduce fuertemente (de $T_K(SU(4))$ para $\delta = 0$ a $T_K(SU(2))$ para $\delta \rightarrow \infty$) y hay picos satélite en las densidades de estados. Además de la resonancia Kondo, el doblete de energía inferior 1 tiene un pico en $\omega = -\delta$ que corresponde a procesos inelásticos mediados por la participación de los electrones de conducción y el doblete 2. El doblete excitado 2 tiene solamente un pico en $\omega = +\delta$. Si los fonones introducen una división ΔE_d , el primer efecto es el de reducir T_K y discriminar ρ_1 y ρ_2 . Estas densidades de estados para $\lambda^2 = 0.4$ en $T = 5 \cdot 10^{-3}$ se muestran en la Fig. 13.7.

Se puede observar en (a) que el pico de transferencia de carga en ρ_1 se mueve a energías más bajas, pero también es más intenso. El aumento del peso espectral del doblete 1 es consistente con la pérdida de peso en el pico de transferencia de carga de ρ_2 (ver (b)). El desplazamiento de la energía es de $\Delta E_d \sim -0.57$. Cerca del nivel de Fermi, la resonancia Kondo sólo se observa en ρ_1 . El efecto del acoplamiento de electrones y fonones es reducir la temperatura de Kondo y, de hecho, el efecto Kondo casi se pierde a $T = 5 \cdot 10^{-3}$. Esto es razonable ya que la temperatura en el Kondo en el límite SU(2) es órdenes de magnitud inferior. La estructura de las réplicas es mucho más rica que en el caso SU(2). En ρ_1 hay réplicas en $\pm n\omega_0$. Las intensidades no muestran un comportamiento monótono: las réplicas en $\omega \sim -0.3$, -0.6 son más intensas. El doblete 2 no está acoplado a los fonones pero debido a procesos inelásticos que implican a los electrones de conducción y al doblete 1, hay un pico satélite en ρ_2 en $\omega \sim 0.35$ y réplicas

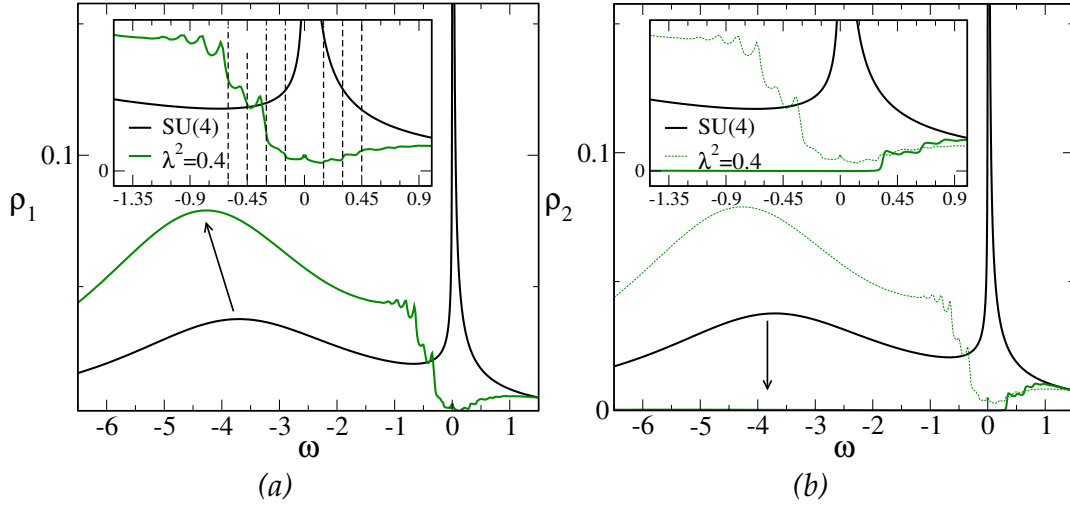


Figura 13.7: Densidad de estados electrónica para el Estado (a) $|1\sigma\rangle$ y (b) $|2\sigma\rangle$ en el límite $SU(4)$ para $\lambda^2 = 0.4$ a $T = 5 \cdot 10^{-3}$. Parámetros: $E_1 = E_2 = -4$, $2\Delta = 1$, $D = 10$, $\omega_0 = 0.15$. El recuadro interior en (a) muestra un zoom al pico Kondo y las líneas corresponden a $\pm n\omega_0$, con n entero. En (b) la densidad de estados para el estado $|1\sigma\rangle$ se muestra con líneas de trazos para comparación.

en $\omega \sim 0.45, 0.6, 0.75$.

Con el fin de entender el efecto de los fonones, la evolución de las densidades de estados con λ se muestra en la Fig. 13.8.

Los picos de transferencia de carga se desplazan hacia energías más bajas a medida que aumenta λ . Las posiciones tienen una dependencia lineal con λ^2 para λ grande como se muestra en la Fig. 13.9(a). El comportamiento más interesante se observa cerca del nivel de Fermi en la Fig. 13.8(b). La temperatura de Kondo se reduce con λ y la resonancia Kondo tiende a desaparecer a $T = 5 \cdot 10^{-3}$. Hay pequeñas estructuras en $\pm n\omega_0$ que en algunos casos son difíciles de distinguir de otros picos. Estos picos más intensos corresponden a los **picos satélite** porque se mueven en energía con λ . Estos picos son un reflejo de la diferencia de energía entre los dobletes. Incluso para $\lambda = 0.158$, no hay peso en el pico de transferencia de carga de ρ_2 como se muestra en la Fig. 13.8(c). Cerca de $\omega = 0$, hay un pico satélite fuerte y pequeñas réplicas. Las posiciones de los picos satélite en ρ_1 y ρ_2 se muestran en la Fig. 13.9(b) como función de λ y λ^2 .

El efecto de los fonones es el esperado. Más comprensión de la interrelación entre el Kondo y las vibraciones se puede obtener para valores inferiores de λ . Los resultados se presentan en la Fig. 13.10 para $\lambda^2 \in [0, 0.025]$ y $T = 5 \cdot 10^{-3}$. A medida que λ disminuye, la densidad de estados parece más similar al caso $SU(4)$. Esto es válido para $\lambda^2 = 0.0001 - 0.001$, que corresponden a $\lambda^2/\omega_0 = 0.0007 - 0.007$. Para $\lambda^2/\omega_0 > 0.012 = T_K(SU(4))$, el pico de transferencia de carga gana (pierde) peso espectral en ρ_1 (ρ_2).

Como en el $SU(2)$, es conveniente estudiar el efecto de fonones para \tilde{E}_1

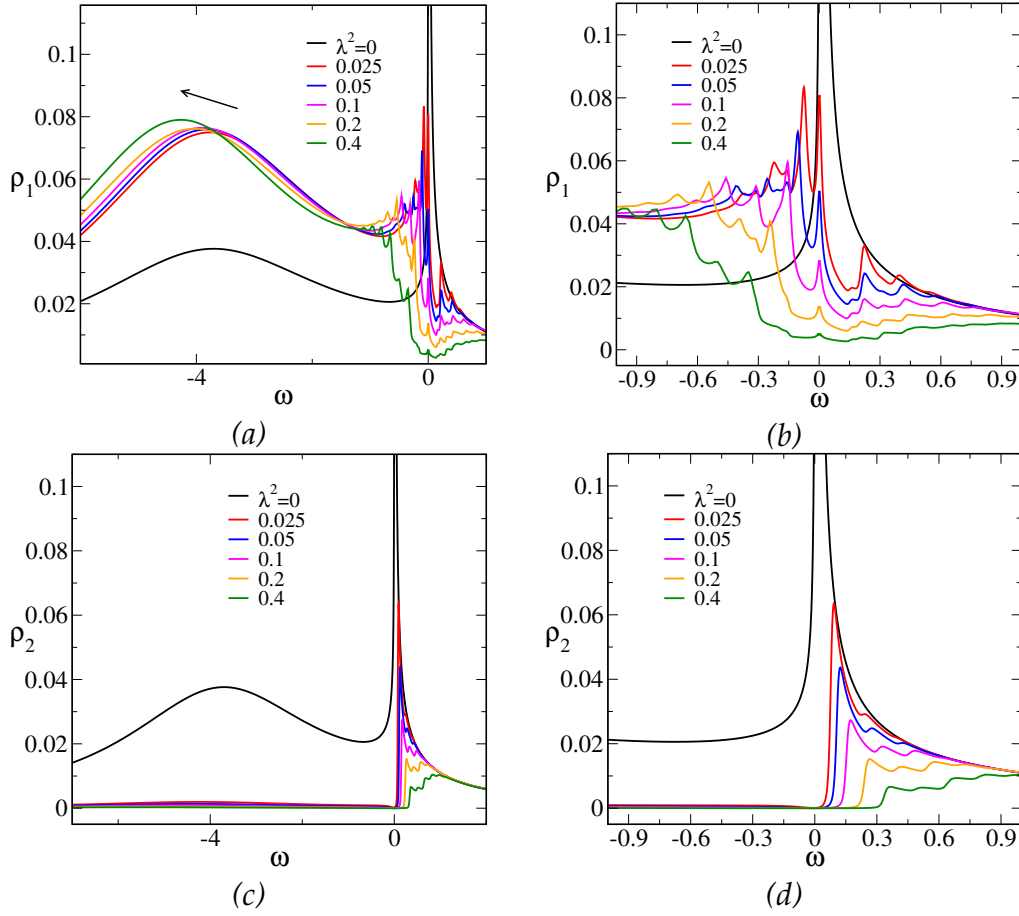


Figura 13.8: Evolución de las densidades de estados electrónicas (a)-(b) ρ_1 y (c)-(d) ρ_2 con el acoplamiento electrón-fonón λ en el límite SU(4). Parámetros: $E_1 = E_2 = -4$, $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$, $D = 10$, $T = 5 \cdot 10^{-3}$.

fijo. Es difícil predecir a priori cuál es la energía renormalizada apropiada. Esto tiene que ver con el hecho de que el acoplamiento de electrones y fonones, y la hibridación con la banda de conducción son interacciones en competencia. Por un lado, la hibridación con las bandas de conducción conduce a una menor energía electrónica. Por otro lado, con respecto al modo de vibración es conveniente desplazar la posición de equilibrio del oscilador para minimizar la repulsión electrostática. Este desplazamiento conduce a una disminución en la hibridación. Por lo tanto, el valor de \tilde{E}_1 está dado por la minimización de la energía de una manera complicada ². Como primera aproximación, hemos utilizado los mismos cambios que en el caso SU(2) para cada λ . Los resultados se muestran en la Fig. 13.11. Los resultados están en la dirección correcta, pero el SU(4) no se recupera. Debe tenerse en cuenta que el procedimiento es similar a la del **Capítulo 10** ya que estamos tratando de recuperar una simetría SU(4) efectiva. La pregunta de fondo es

²Para más detalles sobre esta discusión véase los **Capítulos 11 y 12**

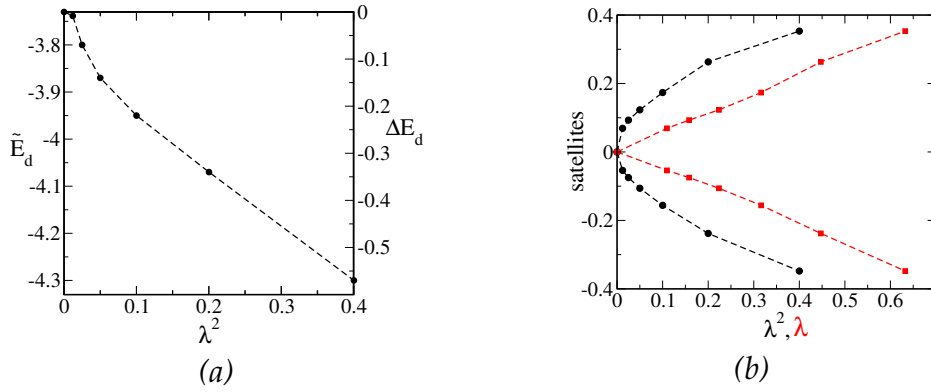


Figura 13.9: (a) Energía renormalizada \tilde{E}_d como función de λ^2 obtenidos a partir del máximo del pico de transferencia de carga. (b) Posiciones de los picos satélite en ρ_1 y ρ_2 en función de λ^2 (círculos negros) y λ (cuadrados rojos).

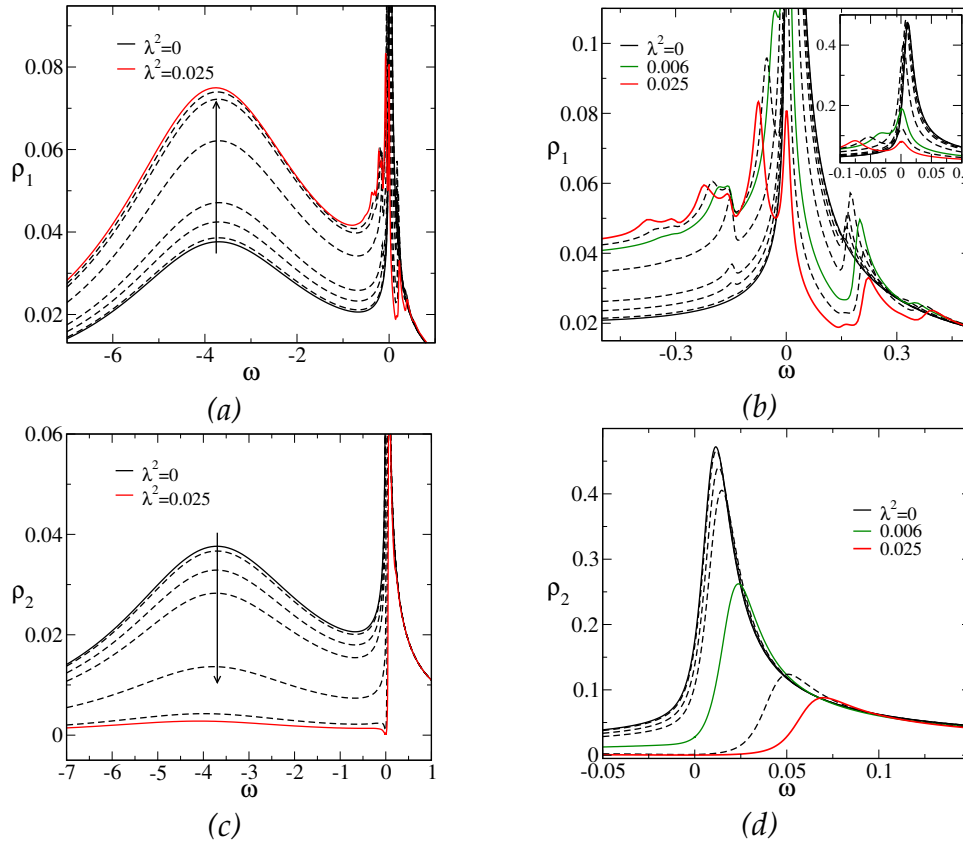


Figura 13.10: Evolución de las densidades de estados electrónicas (a)-(b) ρ_1 y (c)-(d) ρ_2 para acoplamiento electrón-fonón pequeño λ en el límite de simetría $SU(4)$. Las curvas corresponden a $\lambda = 0, 0.0001, 0.0005, 0.001, 0.003, 0.006, 0.012, 0.025$. Parámetros: $E_1 = E_2 = -4$, $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 1$, $D = 10$, $T = 5 \cdot 10^{-3}$.

si restaurando esta simetría efectiva es posible encontrar interferencia destructiva total.

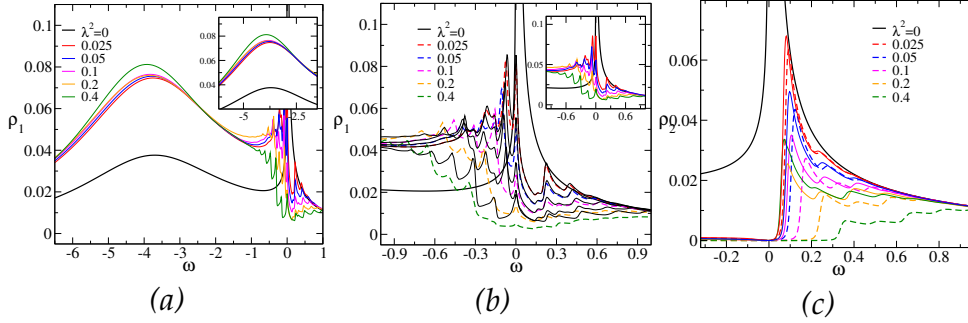


Figura 13.11: Evolución de las densidades de estados electrónicas (a)-(b) ρ_1 y (c) ρ_2 con λ manteniendo fijo $\tilde{E}_1 = -4$ en el límite $SU(4)$. Las correcciones empleadas $E_1 + \delta$ corresponden a $\delta = 0.015, 0.035, 0.085, 0.205, 0.435$. Parámetros: $E_2 = -4, \Gamma_1 = \Gamma_2 = 1, D = 10, T = 5 \cdot 10^{-3}$.

13.4. Conclusiones parciales

Todavía hay mucho trabajo que hacer. Las densidades de estados de equilibrio muestran que el efecto de los fonones es romper la degeneración entre los dobletes. Esto implicaría la ausencia de interferencia destructiva total en el caso de la fase $\phi = \pi$. No obstante, existe una posibilidad interesante que tiene que ver con la afinación de las energías relativas de los dobletes. Todavía estamos haciendo algunas pruebas para mostrar que es posible tener una interferencia destructiva emergente incluso en la presencia de acoplamiento de electrones y fonones.

Hay un lado positivo de los fonones relacionado con la rica estructura de picos cerca del nivel de Fermi en el caso $SU(4)$. Además de las réplicas de la resonancia Kondo a frecuencias positivas y negativas, hay picos satélite causados por los procesos inelásticos que involucran a los electrones de conducción que “comunican” a los dobletes. Esto sería accesible en un experimento y proporcionaría información sobre los modos de vibración y la estructura electrónica.

PARTE IV

Hacia experimentos de transporte en 2DEGs

Fabricación en gases de electrones bidimensionales

Dedico esta parte de la tesis a los primeros pasos dados en la dirección de realizar experimentos de transporte cuántico en **gases bidimensionales de electrones** (2DEGs) en el Laboratorio de Bajas Temperaturas de Bariloche.

He dividido esta parte en dos capítulos. En este capítulo introduzco los gases bidimensionales de electrones y discuto los métodos de caracterización y los aspectos principales de la fabricación en estos sistemas. En el **Capítulo 15** presento mis resultados sobre el efecto Hall cuántico (QHE) para diferentes muestras y configuraciones de medición y para diferentes temperaturas y campos magnéticos. Realizamos las primeras mediciones en el laboratorio combinando campos magnéticos intensos de 16 T y muy bajas temperaturas de 35 mK.

14.1. Un gas bidimensional de electrones

Un gas de electrones en dos dimensiones puede parecer en un principio un juguete teórico, uno de esos modelos idealizados que se utilizan como ejemplo de libro para ilustrar la solución de problemas complejos. Sin embargo existen hoy en día numerosos escenarios en los que la dinámica de los electrones se encuentra confinada en un plano y es posible una descripción efectiva bidimensional. Entre los sistemas que han sido más estudiados se encuentran las heteroestructuras semiconductoras [Ando et al., 1982] y el grafeno [Novoselov et al., 2012]. Sin embargo, también han despertado interés reciente los gases bidimensionales formados en óxidos [Hwang et al., 2012].

Entre las heteroestructuras semiconductoras, la atención estuvo inicialmente puesta sobre los gases bidimensionales de electrones formados en las interfaces metal-óxido-semiconductor de transistores por efecto de campo (MOSFET's) [Ando et al., 1982]. En estos dispositivos se realizaron las primeras mediciones del efecto Hall cuántico (QHE) [v. Klitzing et al., 1980] que mostraron que la resistencia Hall para campos intensos se encuentra cuantizada en fracciones del cuanto de resistencia (o constante de von Klitzing) $R_0 = \frac{e^2}{h} = 25.8 \text{ k}\Omega$, donde e es la carga del electrón y h es la constante de Planck. La formación de este gas bidimensional es consecuencia de la in-

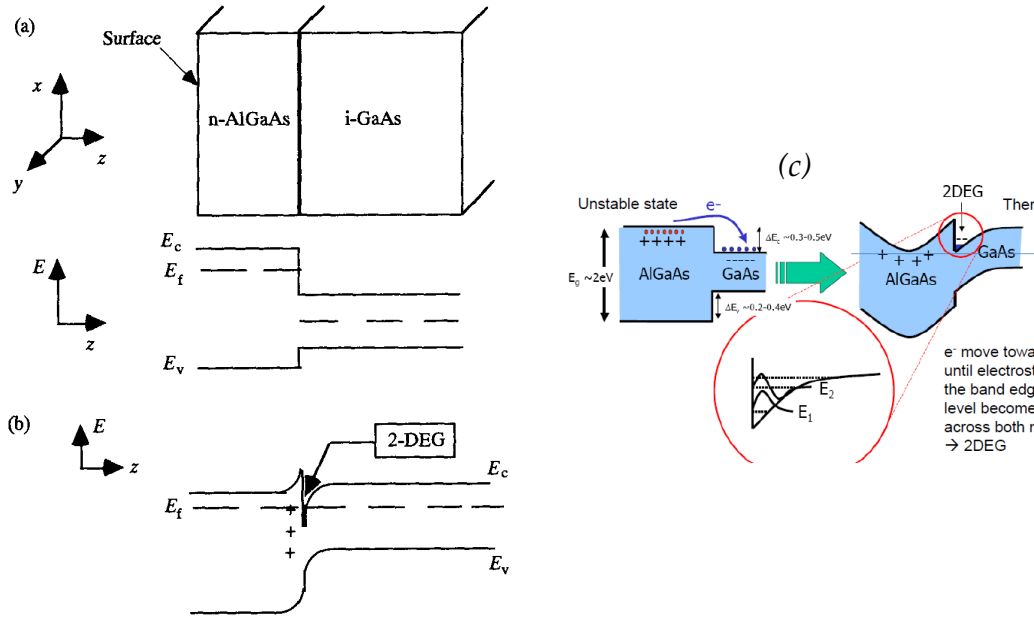


Figura 14.1: Formación del gas de electrones bidimensional en la interfase de una heteroestructura semiconductora de AlGaAs/GaAs.

versión de las bandas en la estructura [Ando et al., 1982], un principio que como veremos también permite entender lo que sucede en AlGaAs/GaAs [Drummond et al., 1986].

Como se muestra en la Fig. 14.1, en el caso del AlGaAs/GaAs el mecanismo que origina el gas bidimensional de electrones en la interfase se basa en una inversión de las bandas producida por la curvatura de las mismas cuando se igualan los potenciales químicos del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y el GaAs [Ando et al., 1982] [Drummond et al., 1986] [Melloch, 1993]. En la figura se muestran las bandas de energía en función de la coordenada z en la que está crecida la estructura (ver Fig. 14.1(a)). El GaAs dopado con Al tiene un gap más grande cuyo tamaño depende de la cantidad de Al, típicamente $x = 0.3^1$. Cuando ambos materiales son puestos en contacto, los electrones del AlGaAs pasan al GaAs buscando igualar los potenciales químicos. Las cargas positivas que quedan del lado del AlGaAs y las cargas negativas del lado el GaAs producen un campo eléctrico que curva las bandas. Como consecuencia de esta curvatura se forma un pozo de potencial aproximadamente triangular (Fig. 14.1(b)). Desde luego esta descripción es muy simplificada. La determinación exacta de esta estructura depende de los parámetros microscópicos de los materiales (constantes dieléctricas, densidad de portadores, etc.) y proviene de una solución auto-consistente de la ecuación de Poisson [Ando et al., 1982] [Drummond et al., 1986].

Como se muestra en la Fig. 14.1(c) en el pozo triangular se forman es-

¹Con x siempre menor que 0.4 [Duruoz, 1996]

tados electrónicos discretos. La diferencia de energía entre el estado fundamental y el primer estado excitado es del orden de 100 meV (~ 1100 K) [Ando et al., 1982] [Drummond et al., 1986] [Duruoz, 1996]. A bajas temperaturas, solo el estado fundamental se encuentra ocupado y la dinámica está confinada en la dirección z (aproximadamente en 100 \AA). Los electrones que forman el gas bidimensional son provistos por una pequeña cantidad de donores Si. Hay diferentes técnicas de crecimientos de estas estructuras semiconductoras pero lo más usual es que estos donores se encuentren todos a una misma profundidad en general por encima del gas. Esto se denomina δ -doping². El hecho de que las impurezas de Si se encuentren físicamente separadas del gas (y por tanto el potencial Coulombiano se apantalla) contribuye a que la movilidad³ en estos sistemas sea muy alta, típicamente $10^5 - 10^7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. El otro factor que contribuye es que los parámetros de red del AlGaAs y del GaAs son muy similares por lo que la estructura crece sin distorsionar la red cristalina.

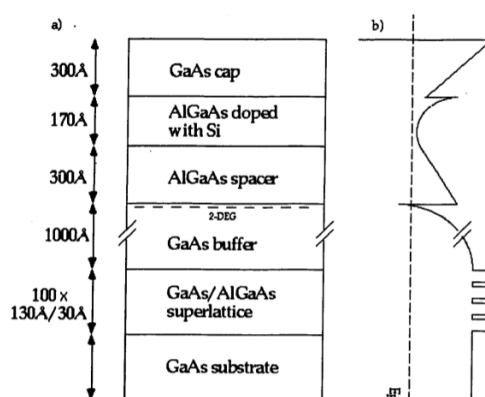


Figura 14.2: Heteroestructura crecida con molecular beam epitaxy (MBE). Tomado de Duruoz [1996].

Para lograr esta perfección a nivel atómico, las heteroestructuras son crecidas capa por capa con Molecular Beam Epitaxy (MBE o haz molecular epitaxial) [Melloch, 1993]. Como se muestra en la Fig. 14.2a), son estructuras complejas⁴. Sobre un sustrato semi-aislante de GaAs se crece una primera capa de GaAs de unos 3000 \AA y luego una super-red de GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ de 100 periodos de $130 \text{ \AA} / 30 \text{ \AA}$ que sirve para limpiar el sistema de impurezas (esencialmente C). Después se fabrica una capa de 1000 \AA de GaAs que actúa como regulador. Es muy importante al terminar esta capa una interrupción del crecimiento de unos segundos. Esto da tiempo a los átomos

²También es posible agregar una cierta densidad de Si durante el crecimiento del AlGaAs. Esto se conoce como *modulation-doping* [Drummond et al., 1986] [Duruoz, 1996]

³No es claro para mí si es movilidad o movilidad.

⁴Los detalles de fabricación que se dan a continuación fueron tomados de la discusión presentada en la tesis de Duruoz del Grupo de Marcus [Duruoz, 1996] y en las tesis de Stewart [Stewart, 1999], Switkes [Switkes, 1999] y Huibers [Huibers, 1999]

que se acomoden ya que esta es la interfase donde se forma el gas. Se crece el espaciador de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ sin dopantes y luego se crece una capa con donores Si. En la figura se ilustra una alternativa al δ -doping que consiste en una densidad de dopantes agregados durante el crecimiento de la capa de 170 \AA . Estos dopantes son los que dan los electrones que ocupan la primer sub-banda en el pozo y forman el gas bidimensional. La muestra tiene finalmente una capa protectora de 300 \AA de GaAs.

Las características de un gas bidimensional

Consideremos un gas de electrones libres en dos dimensiones como el que se muestra en la Fig. 14.3. El Hamiltoniano del sistema es

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2), \quad (14.1)$$

donde p_i es el impulso y m es la masa efectiva. Las soluciones de la ecuación de Schödinger estacionaria $H\Psi(x, y) = \epsilon\Psi(x, y)$ son ondas planas

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (14.2)$$

con autoenergías $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Aquí $S = L_x \times L_y$ es el área de la caja donde se encuentra el gas de electrones. Considerando un potencial infinito en $x = \pm L_x/2$ e $y = \pm L_y/2$, los valores posibles de $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ se encuentran cuantizados $\mathbf{k} = \pi \left(\frac{n_x}{L_x}, \frac{n_y}{L_y} \right)$ con $n_i \in \mathbb{N}$, dando una separación típica $\Delta k \sim \frac{1}{L}$.

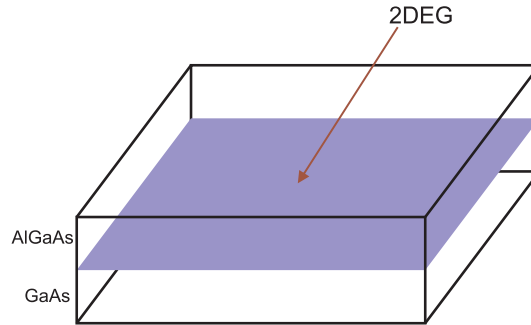


Figura 14.3: Esquema del gas bidimensional en la interfase del AlGaAs/GaAs.

El estado fundamental del gas de electrones se construye ocupando los estados $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ desde el de más baja energía hasta el nivel de Fermi

$$|F\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (14.3)$$

donde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ es el operador fermiónico que crea un electrón en el estado $\mathbf{k}\sigma$ y $|0\rangle$ es el vacío de electrones. El nivel de Fermi ϵ_F queda definido por la

densidad de electrones N/S ,

$$N = \langle F|N|F \rangle = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle F|c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}|F \rangle = \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| < k_F, \sigma} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad (14.4)$$

donde $\langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ es la ocupación media de un estado dada por la distribución de Fermi-Dirac

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)}}, \quad (14.5)$$

donde μ es el potencial químico y $\beta = (k_B T)^{-1}$. A temperatura cero, esta función es un escalón centrado en $\mu(T = 0) = \epsilon_F$. De este modo, $N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \theta(\epsilon_k - \epsilon_F)$.

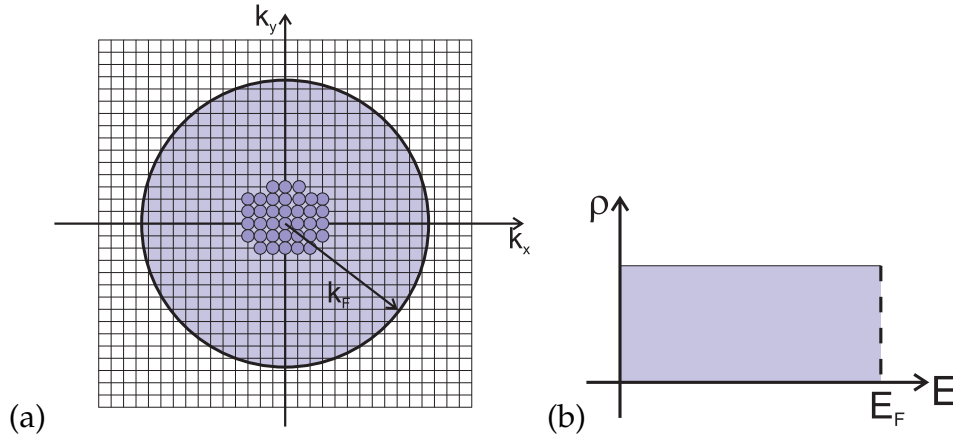


Figura 14.4: (a) Ocupación de los estados en el espacio- k . (b) Densidad de estados del gas de electrones libres en dos dimensiones.

Es usual expresar estas sumas sobre estados en forma de integrales sobre energía. Para esto es necesario introducir la densidad de estados $g(\epsilon)$. Como se muestra en la Fig. 14.4(a) en el espacio de estados (k_x, k_y) las circunferencias de módulo k encierran un número de estados

$$\# \text{estados} = (2s + 1) \frac{\pi k^2}{\frac{(2\pi)^2}{L_x L_y}},$$

donde $(2s + 1)$ es la degeneración de espín. La densidad de estados en el espacio- k se obtiene derivando respecto de k

$$g_k = S \frac{k}{\pi}. \quad (14.6)$$

La densidad de estados puede obtenerse considerando que $g(\epsilon) d\epsilon = g_k dk$, i.e. $g(\epsilon) = g_k \left| \frac{dk}{d\epsilon} \right|$, con lo cual

$$g(\epsilon) = S \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar\pi} \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{E}\hbar} = S \frac{m}{\hbar^2\pi}. \quad (14.7)$$

La densidad de un gas bidimensional de electrones es constante en energía. La misma se muestra en la Fig. 14.4(b). La energía de Fermi resulta de la normalización $N = \sum_{\mathbf{k}, |\mathbf{k}| < k_F, \sigma} \theta(\epsilon_k - \epsilon_k) = \int_0^\infty d\epsilon g(\epsilon) \theta(\epsilon - \epsilon_F) = S \frac{m}{\hbar^2 \pi} \epsilon_F$, i.e.

$$\epsilon_F = \frac{n \hbar^2 \pi}{m}, \quad (14.8)$$

que crece lineal con la densidad superficial de electrones. A esta energía de Fermi corresponde un vector de onda $k_F = \sqrt{2m\epsilon_F}/\hbar = \sqrt{2\pi n}$ y una velocidad de Fermi $v_F = \hbar k_F/m$. La relación entre k_F y la densidad puede interpretarse en el espacio- k considerando la circunferencia de radio k_F que encierra un número de estado igual al número de electrones sobre dos (por cada estado puede haber un electrón con espín up y otro down)

$$n = \frac{N}{S} = \frac{k_F^2}{2\pi}. \quad (14.9)$$

La inversa del vector de onda de Fermi es la longitud de onda de Fermi $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \sqrt{\frac{2\pi}{n}}$. Esta es una escala característica del gas de electrones que permite estimar las dimensiones de un sistema para que los efectos de confinamiento sean relevantes.

Algunos valores

En la Fig. 14.5 se muestra una tabla con las propiedades más importantes del gas de electrones bidimensional. La masa efectiva de los electrones del gas es $m^* = 0.067 m_e$, en unidades de la masa del electrón ($m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ Kg). De la Ec. (14.7), la densidad de estados resulta $g(\epsilon) = 2.8 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ meV}^{-1}$ o lo que es lo mismo, un espaciamiento típico entre niveles $\frac{1}{g(\epsilon)} = 3.57 \mu\text{eV} \mu\text{m}^2 = 41 \text{ mK} \mu\text{m}^2$.

Para una densidad típica $n = 2.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, de la Ec. (14.9) el vector de onda de Fermi resulta $k_F = 1.1 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ y $\lambda_F = 56 \text{ nm}$. La velocidad de Fermi es $v_F = 1.9 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$. De acuerdo a la Ec. (14.8), la energía de Fermi correspondiente es $\epsilon_F = 7.0 \text{ meV} = 81 \text{ K}$.

Caracterización del gas

Una forma de caracterizar el gas bidimensional de electrones es realizar un experimento de transporte. Para ello se define en el gas una geometría como la de la Fig. 14.6, donde se tiene una barra Hall con dos contactos para inyectar una corriente I_b y medir una diferencia de potencial longitudinal $V_L = V_2 - V_1$ y también un voltaje Hall $V_L = V_2 - V_4$ en presencia de un campo magnético. En ausencia de campo, midiendo el voltaje V_L en función de la corriente tenemos la resistencia del gas

$$R_L = \frac{V_L}{I_b},$$

2DEG Property	Symbol	Value	Units
Effective mass	m^*	0.067	$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Spin degeneracy	g_s	2	
Valley degeneracy	g_v	1	
Dielectric constant	ϵ	13.1	$\epsilon_0 = 8.9 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Effective Lande factor	g_L^*	0.4	
Density of states	$\rho(E) = g_s g_v (m^*/2\pi\hbar^2)$	2.8×10^{10}	$\text{cm}^{-2} \text{ meV}^{-1}$
Level spacing	$1/\rho(E)$	3.57	$\mu\text{eV} \mu\text{m}^2$
		41	$\text{mK} \mu\text{m}^2$
Fermi energy	$E_F = (\hbar k)^2/2m^*$	7.0	meV
		81	K
Fermi wave vector	$k_F = (4\pi n_s/g_s g_v)^{1/2}$	1.1×10^6	cm^{-1}
Fermi wavelength	$\lambda_F = 2\pi/k_F$	56	nm
Fermi velocity	$v_F = \hbar k_F/m^*$	1.9×10^7	cm/s
Scattering time	$\tau = m^* \mu_e/e$	4	ps
Mean free path	$l = v_F \tau$	1×10^3	nm
Resistivity	$\rho = 1/n_s e \mu_e$	300	$\Omega/$
Diffusion constant	$D = v_F^2 \tau/2$	7×10^3	cm^2/s
Thermal diffusion length	$l_T = (\hbar D/kT)^{1/2}$	1.6×10^3	nm/\sqrt{T}
Cyclotron energy	$\hbar \omega_c$	1.73	meV/B
		20	T/B
Cyclotron radius	$l_c = \hbar k_F/eB$	70	nm/\sqrt{B}
Magnetic length	$l_m = (\hbar/eB)^{1/2}$	26	$\text{nm}\sqrt{B}$
Zeeman energy	$g_L^* \mu_B B$	23.2	$\mu\text{eV}/B$
		270	mK/B

Table 4.1: Properties of the 2D electron gas. When appropriate, values were calculated assuming a 2DEG density $n_s = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ and mobility $\mu_e = 1 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. The units for B are in Tesla and for T are in Kelvin [Adapted from Foxman93b].

Figura 14.5: Propiedades características de los gas bidimensional en AlGaAs/GaAs. Tomada de Stewart [Stewart, 1999].

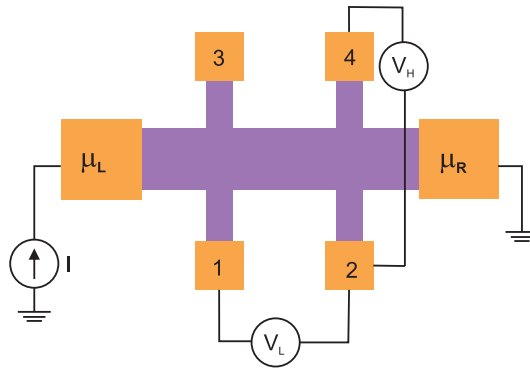


Figura 14.6: Representación del gas bidimensional confinado en una barra Hall.

que puede ser expresada en términos de los parámetros microscópicos.

Usando el modelo de Drude, ante la presencia de un campo eléctrico $\mathbf{E} = E \hat{x}$ se establece una densidad de corriente $\mathbf{J} = J \hat{x}$ que integrada en el ancho de la barra da la corriente $I = J \times W$ (para una corriente independiente de y en el ancho W). La densidad de corriente está relacionada con el campo aplicado por la **conductividad** σ , $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$. Si los electrones en la muestra se aceleran en un tiempo característico τ entre colisiones, alcanzan en el

régimen estacionario una velocidad de deriva $\mathbf{v}_d = \frac{(-e)\mathbf{E}\tau}{m}$. La relación entre la velocidad y el campo es la **movilidad** μ , $\mathbf{v}_d = -\mu\mathbf{E}$. Siendo

$$\mathbf{J} = (-e)n\mathbf{v}_d = (ne\mu)\mathbf{E},$$

luego $\sigma = ne\mu$. La inversa de la conductividad es la resistividad, $\rho = 1/ne\mu$.

Los gases bidimensionales tienen movilidades muy altas, para $\mu = 1 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ y $n = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, la resistividad típica es $\rho = 300 \Omega$ y el tiempo medio entre colisiones $\tau = 4 \text{ ps}$. Si bien este tiempo parece pequeño, las velocidades de Fermi son muy grandes y en consecuencia, el camino libre medio $l = v_F\tau = 1 \cdot 10^3 \text{ nm}$. Esto quiere decir que un electrón en el gas viaja en promedio $1 \mu\text{m}$ sin chocar. Solo basta fabricar estructuras sub-micrón para observar efectos no triviales!. Es notable que la resistividad tiene la misma unidad que la resistencia. De hecho $I = JW = \sigma EW$ y como $V_L = EL$,

$$I = \sigma \frac{W}{L} V_L,$$

i.e. la conductancia es $G = \sigma \frac{W}{L}$ y la resistencia $R = G^{-1} = \rho \frac{L}{W}$. La resistencia y la resistividad tienen las mismas unidades. Esto es una de las características de los sistemas bidimensionales. Según veremos, la resistencia y la conductancia que son parámetros que en principio dependen de las dimensiones, son las cantidades que tienen la información del sistema de electrones.

Midiendo la resistencia y conociendo W , L de la barra se puede determinar una combinación de la movilidad y la densidad de portadores. Para poder conocerlas independientemente es preciso medir el coeficiente Hall. Un electrón clásico moviéndose con una velocidad \mathbf{v} en el plano (x, y) comienza a describir una trayectoria circular en presencia de un campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{z}$ por efecto de la fuerza de Lorentz $\mathbf{F} = \frac{-e}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}$. La dinámica de este electrón es

$$m\ddot{\mathbf{v}} = \frac{(-e)}{c}\dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} = \left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{1}{m}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B},$$

donde $\mathbf{B} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = vB^2$, luego

$$\ddot{\mathbf{v}} = -\left(\frac{eB}{mc}\right)^2 \mathbf{v},$$

que describe una oscilación con frecuencia $\omega_c = \frac{eB}{mc}$, llamada frecuencia de ciclotrón. El radio de la órbita depende de la velocidad. Para un electrón con la velocidad de Fermi, $r_c = \omega_c/v_F$ es el radio de ciclotrón. Como la masa efectiva del gas de electrones bidimensional es mucho más pequeña que la masa del electrón, el efecto del campo magnético es mucho más importante

$$\hbar\omega_c = \hbar \frac{eB}{mc} = 1.73 \text{ meV}/B = 20 \text{ T}/B,$$

con B en Tesla y T en Kelvin. Por su parte, el radio de ciclotrón resulta $r_c = 70 \text{ nm}/\sqrt{B}$.

La dinámica del gas de electrones en presencia de un campo magnético perpendicular puede analizarse con modelo de Drude, según el cual la velocidad de deriva en el régimen estacionario es $\mathbf{v}_d = \mathbf{F}\tau/m = \frac{(-e\tau)}{m} (\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v}_d \times \mathbf{B})$, luego

$$\begin{aligned} v_x + \frac{eB\tau}{mc}v_y &= -\mu E_x \\ v_y - \frac{eB\tau}{mc}v_x &= -\mu E_y \end{aligned} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau \\ -\omega_c\tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}.$$

En esta relación matricial las velocidades pueden ser expresadas en términos de la densidad de corriente,

$$\frac{1}{\mu ne} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau \\ -\omega_c\tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix},$$

donde el tensor de resistividad es

$$\overleftrightarrow{\rho} = \frac{1}{\mu ne} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau \\ -\omega_c\tau & 1 \end{pmatrix}, \quad (14.10)$$

y el tensor de conductividad su inversa. En la condición en la que no hay corriente en la dirección y , $-\frac{\omega_c\tau}{\mu ne}J_x = E_y$. El voltaje Hall es $V_H = E_y W$ y la corriente $I = J_x W$, luego

$$V_H = -\frac{\omega_c\tau}{\mu ne}I = R_H B I, \quad (14.11)$$

donde R_H es el coeficiente Hall, $R_H = -\frac{\omega_c\tau}{\mu neB} = \frac{-1}{nec}$. El coeficiente Hall es inversamente proporcional a la densidad de portadores. Midiendo V_H/I en función de B se puede sacar el valor de n y con este, se puede conocer volver a la resistividad y despejar la movilidad.

Confinamiento por vaciamiento

Como se muestra en la Fig. 14.7(a), los gases bidimensionales en AlGaAs/GaAs resultan una plataforma muy apropiada para la realización de diferentes experimentos de transporte. La razón es que con la aplicación de voltajes negativos en electrodos depositados en la superficie de la muestra es posible **vaciar** ciertas regiones de electrones. Los campos eléctricos aumentan la energía potencial localmente corriendo el nivel de Fermi hasta que no quedan electrones. Como se ilustra en la Fig. 14.7, esto permite “dibujar” en el gas bidimensional estructuras muy variadas donde como en (b) los electrones tienen que atravesar constricciones para ir de la fuente al sumidero o incluso como en (c) pasar por regiones donde se encuentran totalmente confinados.

La formación de una constricción es lo que se conoce como un contacto puntual cuántico. Dado el Hamiltoniano del gas bidimensional,

$$H(x, y)\Psi(x, y) = E\Psi(x, y).$$

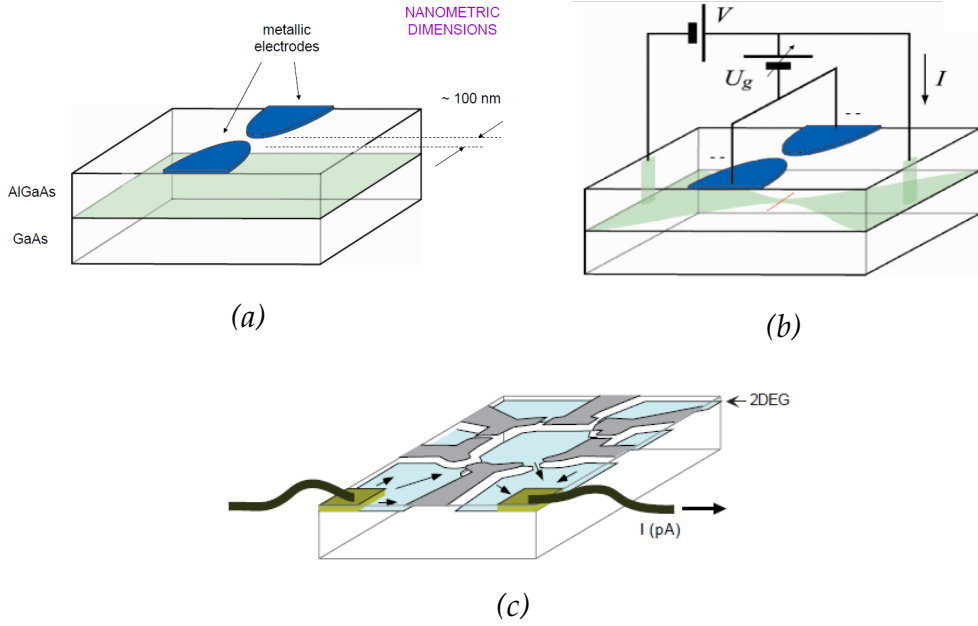


Figura 14.7: (a)-(b) Contacto puntual cuántico y (c) punto cuántico definidos por el vaciamiento en ciertas regiones del gas producidas por la aplicación de voltajes negativos en grillas metálicas depositadas sobre la superficie.

consideremos el caso en que una de las dimensiones de la caja W (en la dirección y) se hace mucho más pequeña que L (en la dirección x). En este caso, si $W \ll L$ el potencial de confinamiento relevante es $V(y)$ y las soluciones de la ecuación de Schrödinger pueden escribirse como $\Psi_{kn}(x, y) = e^{ikx}\chi_n(y)$ donde

$$\tilde{H}(y)\chi_n(y) = E_n\chi(y).$$

El espectro de energía es $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + e_n$ con una separación que depende de la distancia entre e_n y e_{n+1} . Típicamente, si se considera que el potencial forma un pozo, las soluciones tendrán un espaciamiento $\sim \frac{1}{W^2}$. Como se muestra en la Fig. 14.7(b), ajustando el voltaje aplicado en los electrodos V_g se puede controlar el ancho W de la constricción. Es notable que si W es del orden de la decena de nanómetros, es comparable a la longitud de onda de Fermi a bajas temperaturas. Las consecuencias de este confinamiento son drásticas en el transporte. La conductancia en función de V_g disminuye en escalones bien definidos de valor $G_0 = 2e^2/h$ [Wharam et al., 1988]. Este es el cuanto de conductancia y es la conductancia propia de un canal de transmisión balística [Landauer, 1970] [Beenakker and van Houten, 1991] [Datta, 2003].

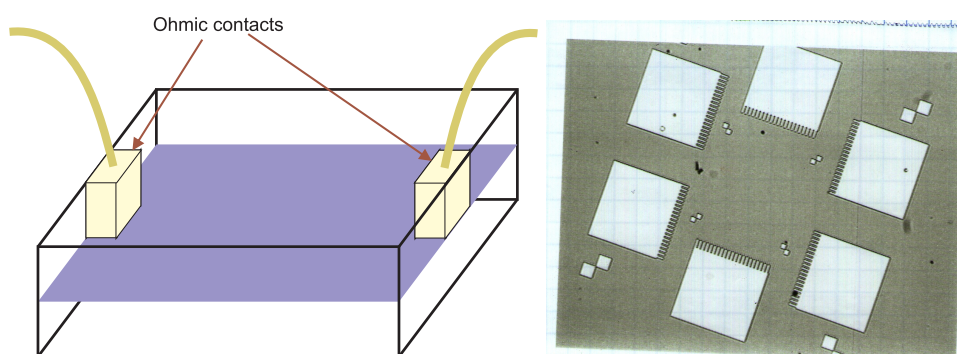
En el caso de un punto cuántico, los electrones se encuentran confinados en un objeto cero-dimensional. Por su similitud, estos sistemas son llamados átomos artificiales [Reed, 1993] [Kastner, 1993] [Kouwenhoven and Marcus, 1998]. Presentan niveles discretos y el transporte a través de ellos puede describirse como efecto túnel resonante [Kouwenhoven et al., 1997] o usando el Modelo de Anderson [Meir and Wingreen, 1991]. Controlando la energía

de los niveles con un voltaje de compuerta, es posible sintonizar estados de alta o baja conductancia. Estos dispositivos han sido propuestos como transistores de un electrón [Kastner, 2000]. Fueron inicialmente explorados en sistemas metálicos utilizando junturas túnel como ladrillos básicos [Devoret and Glattli, 1998] [Esteve, 1992] [Ingold and Nazarov, 1992] y luego en semiconductores usando puntos cuánticos formados en gases bidimensionales. En estos sistemas se había propuesto que era posible observar una realización del efecto Kondo, un efecto de muchos cuerpos que correlaciona electrones localizados y electrones de conducción [Ng and Lee, 1988] [Glazman and Raikh, 1988] [Meir and Wingreen, 1992] [Meir et al., 1993]. Este efecto se conoce desde hace muchos años en sistemas metálicos con impurezas magnéticas [Hewson, 1997]. Un punto cuántico es como una única impureza donde un estado localizado se mezcla con los electrones de la fuente y el sumidero en procesos de *tunneling*. La realización de este efecto a fines de los 90s [Goldhaber-Gordon et al., 1998b] [Goldhaber-Gordon et al., 1998a] [Cronenwett et al., 1998] dio lugar a un montón de intenso trabajo teórico y experimental [Kouwenhoven and Glazman, 2001].

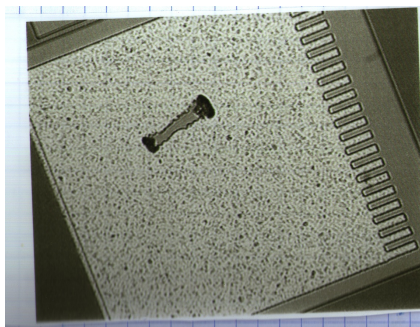
14.2. Fabricación sobre 2DEGs

El proceso de fabricación sobre gases bidimensionales que seguí es el siguiente ⁵:

- En primer lugar se procede a limpiar la muestra con el gas.
- Se realiza una primer litografía dibujando los contactos que van a convertirse en contactos óhmicos.
- Los contactos óhmicos se forman depositando tres materiales: Au, Ge y Ni. Esta evaporación se hace en una evaporadora Joule y luego se realiza el lift-off de la resina.



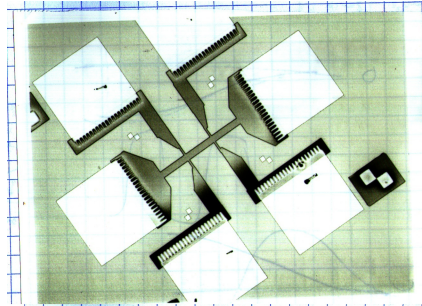
- Se recocce la muestra en un horno rápido. En este proceso se reduce la barrera Schottky en la región en la que están los contactos. Es preciso verificar la resistencia de los contactos.



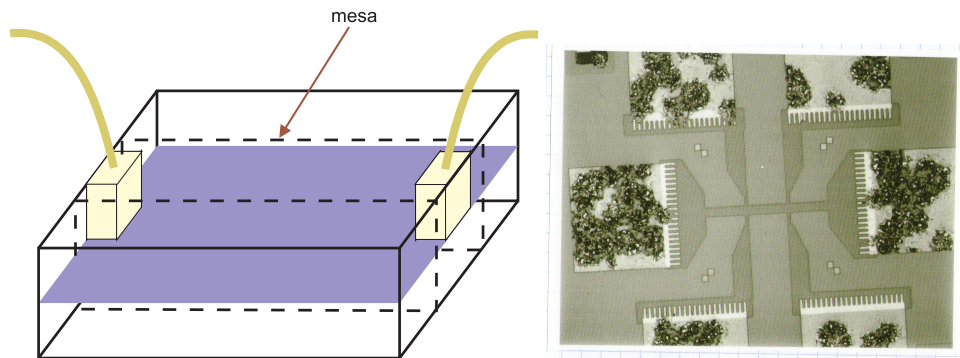
- Se realiza una nueva litografía en la que se dibujan marcas de alineación. Estas marcas sirven para luego definir la *mesa* y los electrodos que sirven de grillas. Las marcas se realizan depositando Al.

⁵Los waffers con los gases fueron crecidos por Ulf Genser en el LPN, Francia y el proceso de fabricación que seguí se apoya en las recetas desarrolladas por Carles Altimiras [Martin, 2010] durante su tesis en el LPN.

- Utilizando estas marcas, se define la mesa en una nueva litografía. En este caso, la litografía se hace sobre resina negativa ma-N. Lo que se irradia es lo que queda protegiendo ciertas regiones y descubriendo otras después del revelado.



- Se realiza un comido químico que destruye el gas de electrones en ciertas partes, aislándolas. Esto es la *mesa*.



- Se procede finalmente a dibujar mediante litografía la estructura de grillas que definen el perfil de potencial visto por el gas de electrones. Estos electrodos son también de Al.

Contactos óhmicos

No existe en la actualidad una receta única para la fabricación de contactos óhmicos [Taylor et al., 1994] [Baca et al., 1997] [Koop et al., 2013]. Existen diversas soluciones del problema pero el objetivo final es reducir la barrera Schottky entre el metal y el semiconductor para poder inyectar electrones en el gas y medir sus propiedades de transporte [Greuter, 2009].

En este trabajo se utilizó un proceso con tres materiales Au, Ge y Ni que son parte de la mayoría de las recetas. La parte más importante del proceso consiste en depositar por evaporación AuGe en una proporción que corresponde al eutéctico, en el cual la aleación tiene su punto de fusión más bajo

de 370 °C. Se deposita inicialmente una capa de Ni que ayuda a la adherencia. Se agrega además una capa gruesa de Au para el contacto eléctrico [Martin, 2010] [Iqbal et al., 2014].

Para poder hacer esto en el laboratorio, adapté una evaporadora Joule para poder co-evaporar tres materiales simultáneamente. Esto requiere de tres navetas donde se depositan los materiales y se hace circular corriente, una placa movil (shutter) para poder evaporar cuando se tiene la tasa apropiada y evitar la emisión inicial de impurezas y un cristal de cuarzo estándar para medir la cantidad evaporada.

Una vez realizada la evaporación se realiza el lift-off y se coloca la muestra dentro de horno de recocido rápido [Koop et al., 2013] [Greuter, 2009] [Iqbal et al., 2014]. La idea es precalentar la muestra, subir un poco por encima del punto de fusión del AuGe y dejar un minuto para luego calentar un poco más ayudando a la difusión de ambos. El Ge baja la barrera Schottky aumentando el dopaje. Los electrones del Au pueden pasar de los cables en la superficie al gas 1000 Å en el interior. La temperatura se sube a unos 400°C por 40 s y luego desciende rápidamente. Si la temperatura sube más o permanece mucho tiempo alta, los átomos de la muestra difunden creando imperfecciones y arruinando la movilidad del gas. Todo el proceso se realiza con la circulación permanente de una mezcla inerte de N/H [Martin, 2010].

Para poder realizar este recocido rápido en el laboratorio realizamos junto a Julio Guimpel y Manuel Gonzalez un horno casero de lámparas. El control de potencia y temperatura lo realizamos con un PID programado en un Arduino. Con el mismo logramos una rampa de temperatura como la que se muestra en la Fig.14.8.

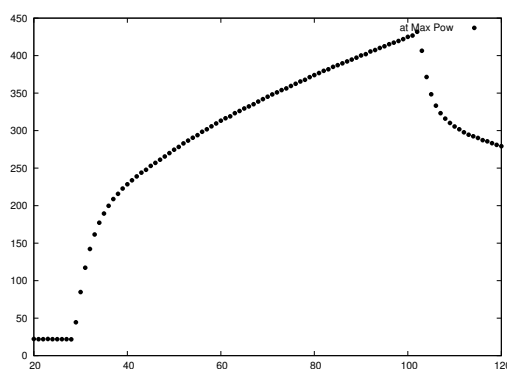


Figura 14.8: Rampa de temperatura en el horno de annealing rápido.

Definición de la mesa

Para definir la *mesa* y aislar unas partes del gas respecto de otras, exploré dos opciones. Una posibilidad es hacer una litografía con resina positiva, depositar una máscara de Al para proteger algunas partes y luego del comido, sacar el Al con KOH (ver Fig. 14.9(a)) [Martin, 2010]. El problema de esto

es que el KOH tiene que estar muy diluido porque también ataca al GaAs. La segunda opción que fue la que funcionó consiste en proteger con resina negativa ma-N las partes de la muestra que se desee (Fig. 14.9(b)) y luego del comido quitar la resina con acetona (Fig. 14.9(c)).

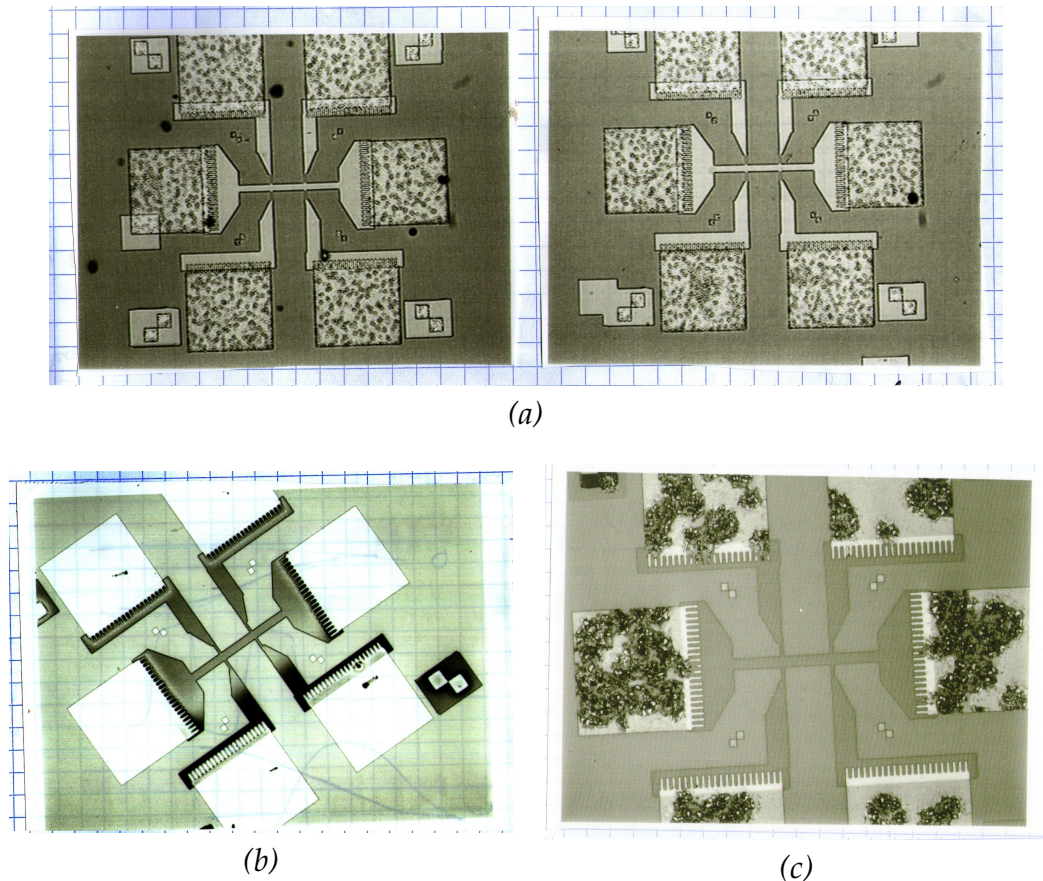


Figura 14.9: (a) Opción uno para la mesa: proteger con una máscara de Al. (b) Opción dos: proteger con una capa de resina negativa ma-N. (c) Muestra después del comido químico.

El comido químico se realiza con una solución de ácido orto-fosfórico [Martin, 2010]. La profundidad del comido es típicamente de unos 100 nm. El rate depende de muchos factores y es mejor calibrarlo.

Experimentos

En el **Capítulo 15** discuto los resultados obtenidos en dos muestras como la de la Fig. 14.9(c) donde la *mesa* se realizó delimitando al gas en una barra Hall con seis terminales. Esto permitió por un lado caracterizar el gas bidimensional y por otro lado realizar las primeras mediciones del efecto Hall cuántico en el laboratorio.

El Efecto Hall Cuántico

“The birthday of the quantum Hall effect (QHE) can be fixed very accurately. It was the night of the 4th to the 5th of February 1980 at around 2 a.m. during an experiment at the High Magnetic Field Laboratory in Grenoble”.

Klaus von Klitzing

25 Years of Quantum Hall Effect, Poincaré Seminar (2004)

Desde su descubrimiento a finales de 1970, el efecto Hall cuántico (QHE) ha llamado la atención de la comunidad científica de todo el mundo. La primera observación experimental de la cuantización de la resistencia Hall se debe a von Klitzing [v. Klitzing et al., 1980] quién recibió el premio Nobel unos años más tarde [von Klitzing, 1986]. Para tener una idea de la relevancia de este descubrimiento vale la pena leer la opinión del propio von Klitzing 25 años después [von Klitzing, 2004]. La cuantización de la resistencia Hall permite una determinación precisa de la combinación de constantes fundamentales h/e^2 y en consecuencia es posible obtener un valor de la constante de estructura fina $\alpha = \frac{2\pi e^2}{hc}$ en un experimento de materia condensada ¹. Más aún, los patrones de resistencias se basan hoy en día en mediciones del efecto Hall cuántico. La sorpresa del descubrimiento de von Klitzing de plateaus de resistencia Hall en función del campo magnético o de la densidad de portadores para algunos valores de llenado entero de los niveles de Landau vendría seguida de otra sacudida cuando Tsui, Stormer y Gossard descubrieron el efecto Hall cuántico fraccionario [Tsui et al., 1982]. La aparición de plateaus en la resistencia Hall para llenados no enteros sino en fracciones (y no cualquier fracción) generó un oleada de intensa labor experimental y teórica [Stormer et al., 1999]. Tsui, Stormer y Laughlin fueron también reconocidos con el premio Nobel en el año 1998 [Stormer, 1999]. Laughlin fue el teórico que puso la piedra angular de la teoría para explicar el efecto Hall cuántico fraccionario [Laughlin, 1983].

Entre la literatura disponible existen varios libros que pueden servir de guía. El primero de ellos es el de Girvin y Prange y describe el estado del arte sobre “los efectos Hall” al año 1987 [Prange and Girvin, 1987]. El segundo es de Das Sarma y brinda una descripción más actualizada de los avances en la comprensión de ambos efectos, en particular del QHE fraccionario [Sankar

¹Tal vez vale la pena recalcar que la constante de estructura fina es la constante de acoplamiento entre las partículas cargadas y los fotones.

[Das Sarma, 2004](#)]. Una buena compilación de artículos importantes en el tema puede encontrarse en el libro de Stone [\[Stone, 1992\]](#). Por último, hay un libro muy actualizado de Tapash Chakraborty que puede ser de utilidad para entender los nuevos estados cuánticos explorados en el régimen de Hall fraccionario [\[Chakraborty and Pietiläinen, 2013\]](#). Me gustaría agregar además el capítulo de libro escrito por A. MacDonald [\[MacDonald, 1991\]](#), una lecture del M. Girvin [\[Girvin, 1999\]](#) y una lecture muy reciente de M. Goerbig donde se analiza también el efecto Hall cuántico en grafeno [\[Goerbig, 2009\]](#).

15.1. El gas bidimensional en presencia de un campo magnético

Consideremos un gas bidimensional de electrones libres en la presencia de un campo magnético perpendicular. El Hamiltoniano es

$$H(x, y) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - g_L \mu_B B \sigma,$$

donde \mathbf{A} es el potencial vector, g_L es el factor de Landé efectivo ($g_L = 0.44$ para el gas 2D en GaAs ²), μ_B es el magnetón de Bohr y $\sigma = \pm 1/2$. Para un campo magnético en la dirección z , el potencial vector en el calibre de Landau es $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, de modo que $\nabla \times \mathbf{A} = B\hat{z}$. Con esta convención y olvidando por un momento la energía Zeeman,

$$H(x, y) = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(p_x + \frac{eBy}{c} \right)^2 = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{eBy p_x}{mc} + \frac{1}{2} m \left(\frac{eB}{mc} \right)^2 y^2 + \frac{p_x^2}{2m}.$$

Proponiendo una solución $\Psi_{kn}(x, y) = e^{ikx} \chi_n(y)$, las funciones $\chi_n(y)$ deben satisfacer

$$\left[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{\hbar e B y k}{mc} + \frac{1}{2} m \left(\frac{eB}{mc} \right)^2 y^2 \right] \chi_n(y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \chi_n(y),$$

que es el problema de un oscilador armónico de frecuencia $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ con su centro desplazado dependiendo de k . Completando cuadrados

$$\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 \left[y^2 + \frac{2\hbar y k}{m\omega_c} \right] = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 \left[y^2 + \frac{2\hbar y k}{m\omega_c} + \left(\frac{\hbar k}{m\omega_c} \right)^2 \right] - \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k^2}{m},$$

donde llamando $y_k = \frac{\hbar k}{m\omega_c}$,

$$\left[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y + y_k)^2 \right] \chi_n(y) = E \chi_n(y).$$

²Ver la Fig. 14.5 en el **Capítulo 14**.

Las soluciones $\{\chi_n(y+y_k)\}$ son polinomios de Hermite de orden n con autoenergías $E = \hbar\omega_c(n + 1/2)$. Como se muestra en la Fig. 15.1(a), estos niveles de energía llamados **niveles de Landau** no dependen de k . En un tratamiento semi-clásico del transporte, si uno construyese un paquete con estas soluciones, el centro de masa del paquete permanecería fijo ya que su velocidad $v \sim dE/dk = 0$.

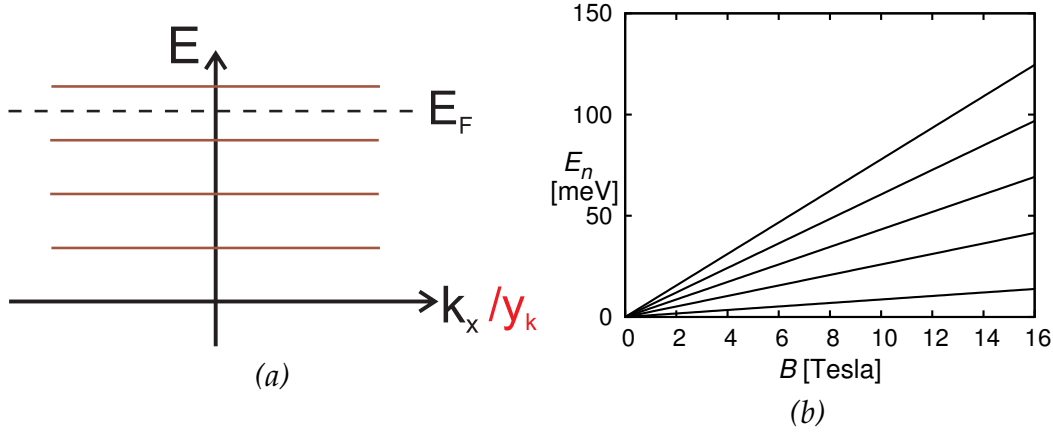


Figura 15.1: (a) Formación de los niveles de Landau. (b) Evolución del espectro con campo magnético.

Como efecto de la formación de los niveles de Landau, el espectro continuo de energías electrónicas se convierte en un espectro discreto (ver Fig. 15.1(b)). La separación de energía es $\hbar\omega_c$, que para los valores típicos del **Capítulo 14** resulta $\hbar\omega_c = \frac{eB}{mc} = 1.73 \text{ meV/B} = 20 \text{ T/B}$, con B en Tesla y T en Kelvin.

Estos niveles se encuentran muy degenerados ya que hay muchos estados k posibles con el mismo n . Teniendo presente la evolución de la densidad de estados bidimensional ante la presencia de un campo magnético (Fig. 15.2(a) - (b)), una forma sencilla de hacer la cuenta es pensar que la cantidad total de estados hasta una energía E es

$$\int_0^E g(\epsilon) d\epsilon = \frac{m}{\pi\hbar^2} E,$$

pero la cantidad de niveles de Landau es $E/\hbar\omega_c$, por lo que la cantidad de estados por nivel de Landau es

$$\delta_L = \frac{m\omega_c}{\pi\hbar}. \quad (15.1)$$

La degeneración crece linealmente con el campo magnético como se muestra en la Fig. 15.2(c).

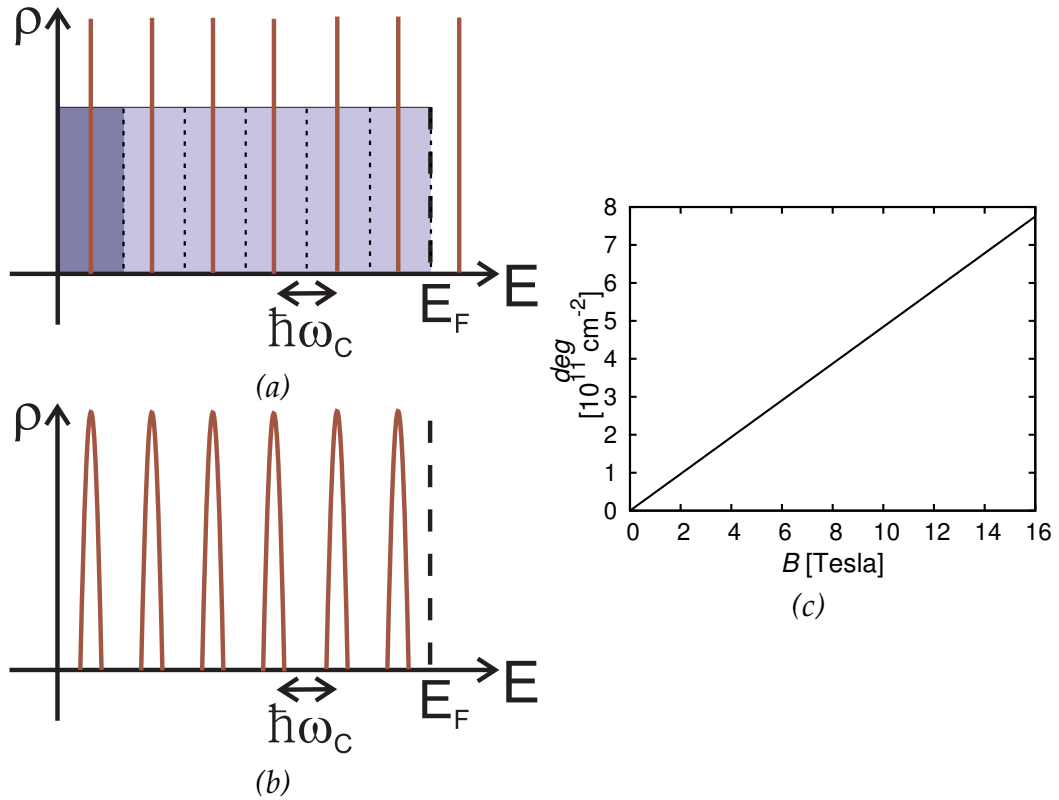


Figura 15.2: (a)-(b) Densidad de estados del gas bidimensional cuando se forman los niveles de Landau. (c) Degeneración de un nivel en función del campo magnético.

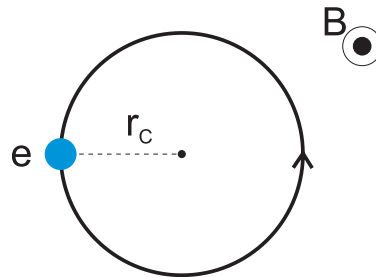


Figura 15.3: Movimiento orbital de un electrón en presencia de un campo magnético.

Imágen intuitiva

Otra forma posible de pensar los niveles de Landau es como producto de la cuantización de las orbitas electrónicas. Como se muestra en la Fig. 15.3, un electrón en presencia de un campo magnético describe una órbita con un radio r_c y un perímetro $2\pi r_c$, donde r_c es el radio de ciclotrón. En el límite cuántico, el perímetro tiene que ser un múltiplo entero de la longitud de onda del electrón: $2\pi r_c = n\lambda = n\frac{2\pi}{k} = n\frac{2\pi\hbar}{mv}$, luego $v = n\frac{\hbar}{mr_c}$. Teniendo en

cuenta que $r_c = v/\omega_c$,

$$v^2 = n \frac{\hbar \omega_c}{m} = n \frac{\hbar e B}{m^2 c} \Rightarrow \frac{1}{2} m v^2 = n \frac{1}{2} \frac{\hbar e B}{m c} = n \hbar \omega_c / 2,$$

que es cercano al resultado correcto $E = \hbar \omega_c (n + 1/2)$. Para que los efectos de la cuantización de las órbitas sean apreciables es preciso que el tiempo entre colisiones τ sea mayor que el periodo de las oscilaciones, i.e. $\omega_c \tau \gg 1$. En términos de la movilidad, $\tau = m\mu/e$, luego $\omega_c \tau = \frac{eB}{mc} \frac{m\mu}{e} = \frac{B\mu}{c} \gg 1$. Para movilidades altas, el efecto de la cuantización se hace visible a campos más bajos. Para $\mu = 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, el campo tiene que ser mayor a 10^{-2} Tesla.

Análisis de la ocupación de los niveles

Para una densidad fija n , la cantidad de niveles de Landau que están ocupados son los necesarios para que $N \times \delta_L = n$. Como la degeneración de cada nivel crece con campo, la cantidad de niveles de Landau ocupados va cambiando. Esto se muestra en la Fig. 15.4, donde las líneas de trazos corresponden a $n = 2.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 5.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

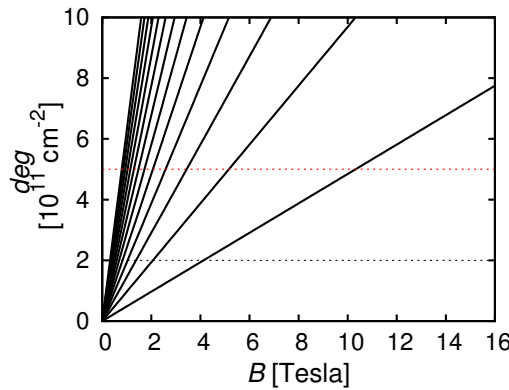


Figura 15.4: Evolución de la degeneración de un nivel de Landau (y sus múltiplos enteros) con el campo magnético. Las líneas de trazos corresponden a una densidad fija $n = 2.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 5.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

El efecto Zeeman

El término Zeeman en el Hamiltoniano

$$E_Z = -g_L \mu_B B \sigma,$$

da lugar a una energía de separación de $23.2 \mu\text{eV}/B$, con B en Tesla, o $270 \text{ mK}/B$ entre los estados con espín para arriba y espín para abajo. Esta separación es muy pequeña pero puede hacerse importante a temperaturas bajas y campos magnéticos intensos.

La formación de estados de Borde

La formación de niveles de Landau en el gas bidimensional tiene un efecto notable en las propiedades de transporte. Consideremos como antes una barra de longitud L y ancho W , con $L \gg W$.

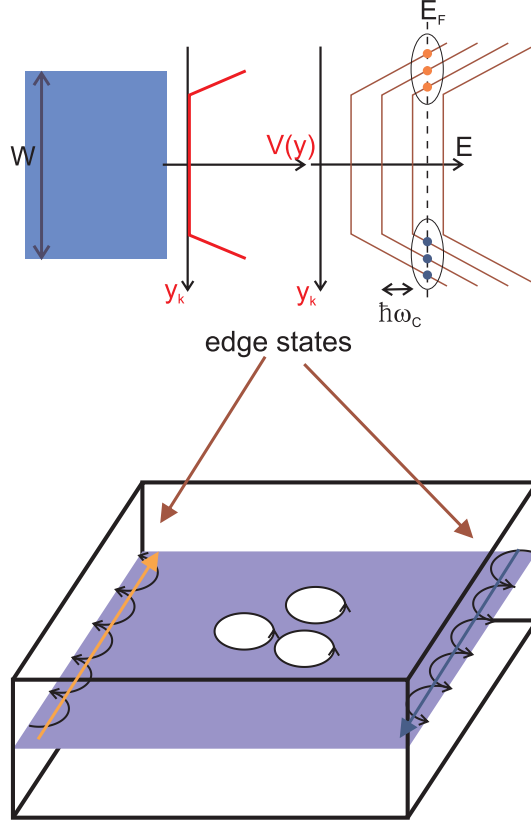


Figura 15.5: Formación de los estados de borde.

Para tener en cuenta el tamaño finito de la muestra incluimos en el Hamiltoniano un potencial de confinamiento suave cerca del borde

$$H(x, y) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(y),$$

donde podemos considerar que $V(y)$ es una perturbación. Como se muestra en la Fig. 15.5, la corrección a primer orden es

$$\langle \Psi_{kn} | H(x, y) | \Psi_{kn} \rangle = E_n^{(0)} + \langle \chi_n(y - y_k) | V(y) | \chi_n(y - y_k) \rangle \sim E_n^{(0)} + V(y_k),$$

por lo que los estados cerca de los bordes tienen una velocidad finita en el nivel de Fermi. La formación de **estados de borde** es fundamental para comprender el efecto Hall cuántico. El primero en reconocer su importancia fue Halperin [Halperin, 1982]. Estos estados son los responsables de transportar la corriente. Pueden pensarse como *skipping-orbits* que se producen en los bordes por una reflexión elástica con el borde (ver figura). Voy a discutir esto más en profundidad a la luz de los resultados experimentales. Sin

embargo, es importante mencionar dos características fundamentales de los estados de borde. La primera es que son **quirales**. Esto quiere decir, como se observa en la figura, que en cada uno de los bordes los electrones se mueven en una dirección dada. En un borde de derecha a izquierda y en el otro al contrario. La segunda característica es que al estar separados espacialmente, los estados de borde son insensibles a los procesos de back-scattering. Los elementos de matriz que mezclan estados yendo en una dirección con los que van en sentido contrario son cero debido a la separación espacial de los mismos. Esto significa esencialmente que los estados de borde se comportan como **canales quasi-unidimensionales balísticos**.

15.2. Propiedades de transporte

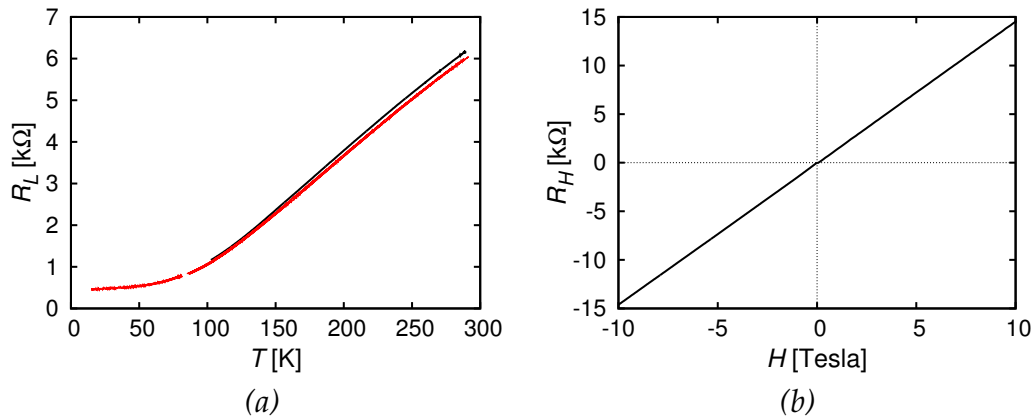


Figura 15.6: (a) Resistencia longitudinal en función de la temperatura y (b) resistencia Hall en función del campo magnético a $T = 84$ K.

Las primeras mediciones que presento corresponden a temperaturas altas. Como se muestra en la Fig. 15.6(a) la resistencia longitudinal en función de la temperatura sigue un comportamiento lineal hasta que satura en un valor que está dado por la presencia de impurezas. a $T = 84$ K se tiene $R_L = 811 \Omega$. De la relación lineal entre el voltaje Hall y el campo aplicado (Fig. 15.6(b)),

$$\frac{V_H}{H} = -0.00146 \frac{V}{T} = \frac{I}{ne},$$

con $e = -1.6 \cdot 10^{-19} C$, $I = 1.0 \cdot 10^{-6} A$ obtiene $n = 4.3 \cdot 10^{11} cm^{-2}$. En combinación con el valor de R_L

$$\frac{V_L}{I} = 811 \Omega = \frac{1}{ne\mu} \left(\frac{L}{W} \right),$$

con $L = 95 \mu m$ y $W = 20 \mu m$ se obtiene $\mu(86 K) = 85100 cm^2/Vs$. Esta no es una movilidad muy alta para los valores típicos de gases bidimensionales y nos da como información que la muestra tiene bastante desorden.

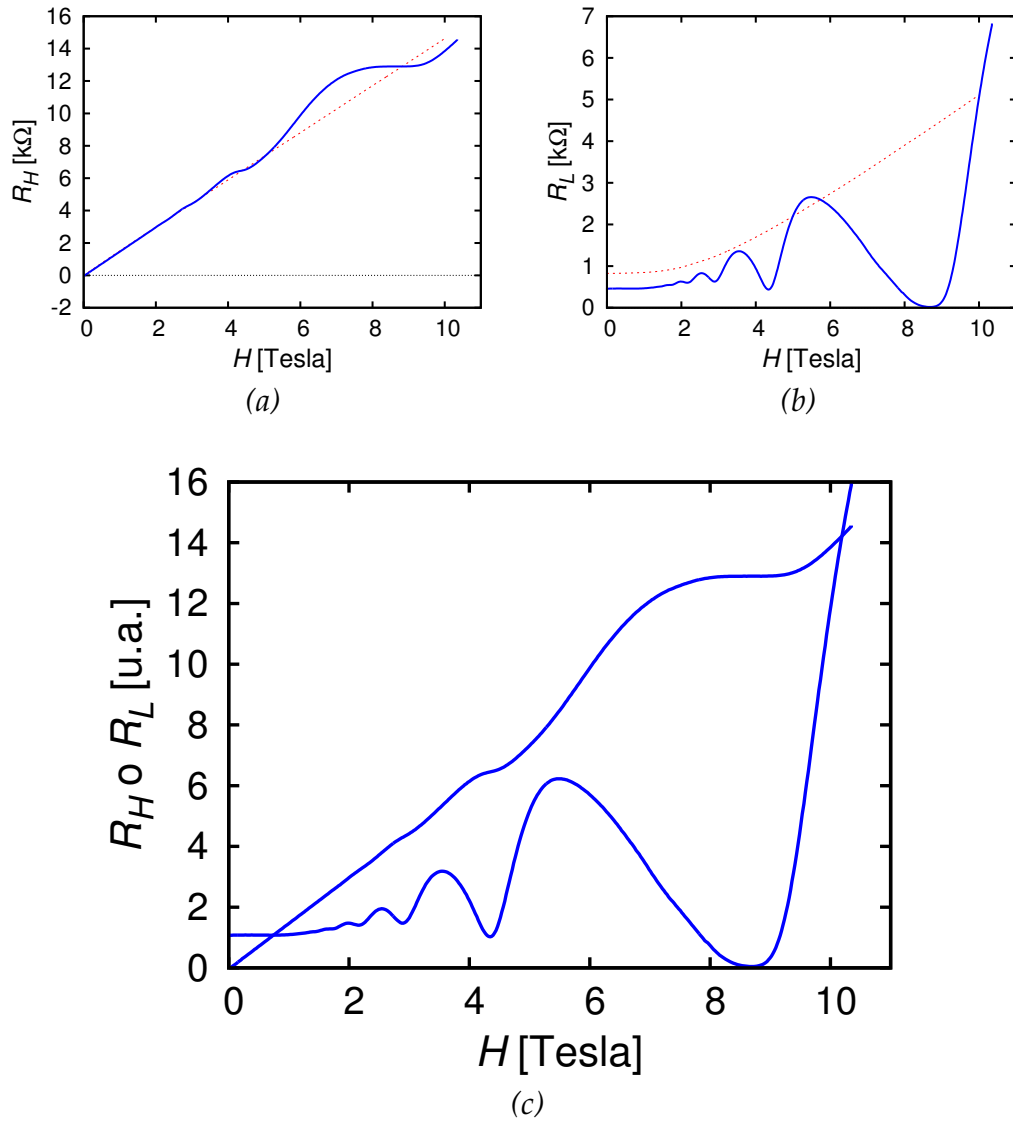


Figura 15.7: (a) Resistencia Hall, (b) resistencia longitudinal y (c) ambas en función del campo magnético a $T = 11$ K. Con línea roja a trazos se muestra lo mismo a $T = 84$ K.

Cuando bajamos la temperatura, por ejemplo hasta $T = 11$ K, el comportamiento clásico observado cambia drásticamente. Como se muestra en la Fig. 15.7(a), la resistencia Hall abandona el comportamiento lineal y a ciertos valores de campo muestra “escalones”. Estos escalones son los plateaus del efecto Hall cuántico y tienen un valor de resistencia muy bien determinado. Esto es un comportamiento que va de “clásico a cuántico” con solo mover una perilla. Además de estos escalones en la resistencia Hall, la resistencia longitudinal presentada en la Fig. 15.7(b) comienza a mostrar oscilaciones. Estas oscilaciones se conocen como oscilaciones de Shubnikov de Haas y se deben a las oscilaciones en la densidad de estado producidas por la cuantización de Landau. Sin embargo, más allá de las oscilaciones, la resistencia longitudinal se va a cero a algunos valores de campo. Esto, como

veremos, es una característica del régimen de Hall cuántico. Resulta revelador mirar ambas resistencias en la misma gráfica. Como se muestra en la Fig. 15.7(c), para los valores de campo a los que se observan los escalones en R_H , la resistencia longitudinal cae a cero.

15.2.1. El efecto Hall cuántico

Para tratar de entender el origen de estos comportamientos es conveniente traer a la memoria algunos conceptos desarrollados en el **Capítulo 3** y la imagen de los estados de borde que acabamos de presentar. Como se muestra en la Fig. 15.8(a), para algún campo magnético B , tenemos los niveles de Landau separados en $\hbar\omega_C \propto B$ corregidos con el potencial de los bordes.

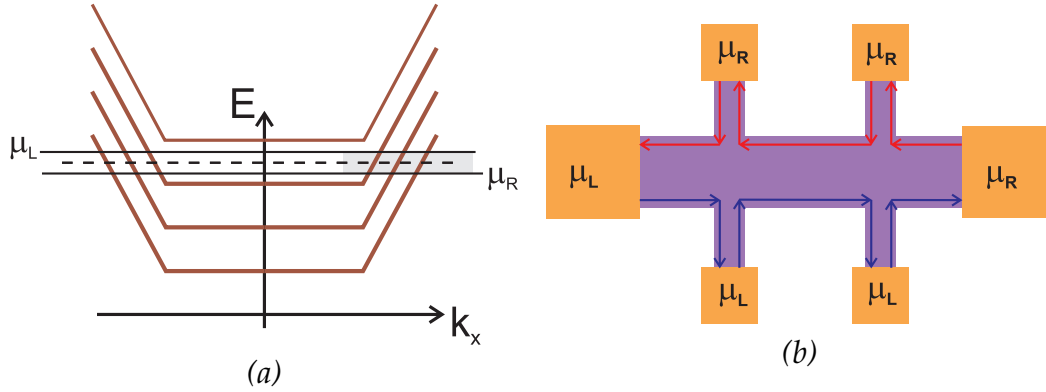


Figura 15.8: (a) Niveles de Landau con la corrección por los bordes. (b) Barra hall con los potenciales químicos en el régimen del QHE.

Cuando aplicamos una corriente I en la muestra (como se esquematiza en la Fig. 14.6), los electrones en los reservorios fuente y sumidero tienen potenciales químicos bien definidos μ_L y μ_R . Como se discutió en el **Capítulo 3**, estos electrones ocupan los estados que se encuentran en el rango de energías $\mu_R < \epsilon < \mu_L$. Los estados que pueden ser ocupados por los electrones son los **estados de borde**. Está claro que la cantidad de estados de borde es la misma que el número de niveles de Landau por debajo del nivel de Fermi (lo que depende del campo magnético). Como se muestra en la Fig. 15.8(b), el hecho de que estos estados sean balísticos determina los potenciales químicos medidos por las sondas de voltajes. Con esta imagen sencilla se puede ver fácilmente que: 1) no hay caída de voltaje longitudinal. 2) El voltaje Hall es $V_H = (\mu_L - \mu_R)/e$. De acuerdo al **Capítulo 3**, la corriente $I = GV = G(\mu_L - \mu_R)/e$, donde G es la conductancia que en este caso vale $G = Ne^2/h$, donde N es el número de estados de borde. De esto sale que: $R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{1}{N} \left(\frac{h}{e^2} \right)$. Es decir, la resistencia Hall está cuantizada en fracciones de $\frac{h}{e^2} = 25.8 \text{ k}\Omega$.

³Esta cuenta se puede hacer en el formalismo multiterminales de Landauer-Büttiker (ver

Como se muestra en la Fig. 15.9, esta cuantización puede observarse claramente a $T = 1.78$ K. Las líneas a trazos corresponden a $(h/e^2)(1/N)$, con $N = 1, 2, 3, 4, 6, 8, \dots$. Para campos muy grandes es posible ver incluso plateaus de Hall resueltos en espín.

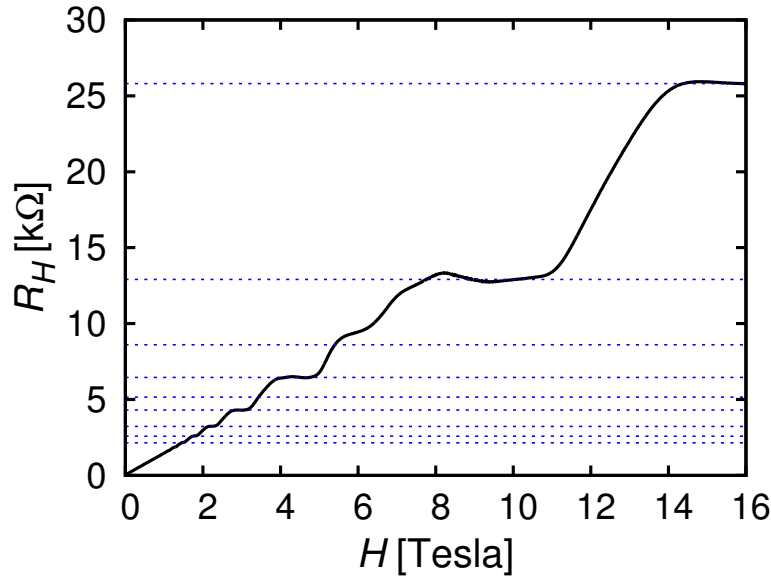


Figura 15.9: Resistencia Hall en función del campo magnético a $T = 1.78$ K. Las líneas a trazos corresponden a $(h/e^2)(1/N)$, con $N = 1, 2, 3, 4, 6, 8, \dots$.

Cuál es el efecto de bajar la temperatura? La disminución de la temperatura tiene varias consecuencias. Por un lado, evita la población térmica de los niveles de Landau a valores de campos más pequeños: $k_B T \ll \hbar \omega_C$. En segundo lugar, a menor temperatura hay una movilidad mayor y por tanto un τ más largo y los electrones pueden completar órbitas a campos más bajos. Como se observa en la Fig. 15.10, la transición entre plateaus es más abrupta a temperaturas más bajas.

En la Fig. 15.10, puede observarse claramente que a diferencia de la Fig. 15.7, la resistencia longitudinal cae a cero para valores mucho menores de campo indicando que el régimen del efecto Hall cuántico se alcanza antes. Es posible observar que solo hay resistencia en la transición entre plateaus. Como se muestra esquemáticamente en la Fig. 14.3, al aumentar el campo para pasar de un número de estados de borde a otro hay un momento en el que todos los estados localizados pueden ser ocupados. Esto trae como consecuencia que los estados de los bordes están conectados y no son más balísticos. Esto da como resultado una resistencia finita.

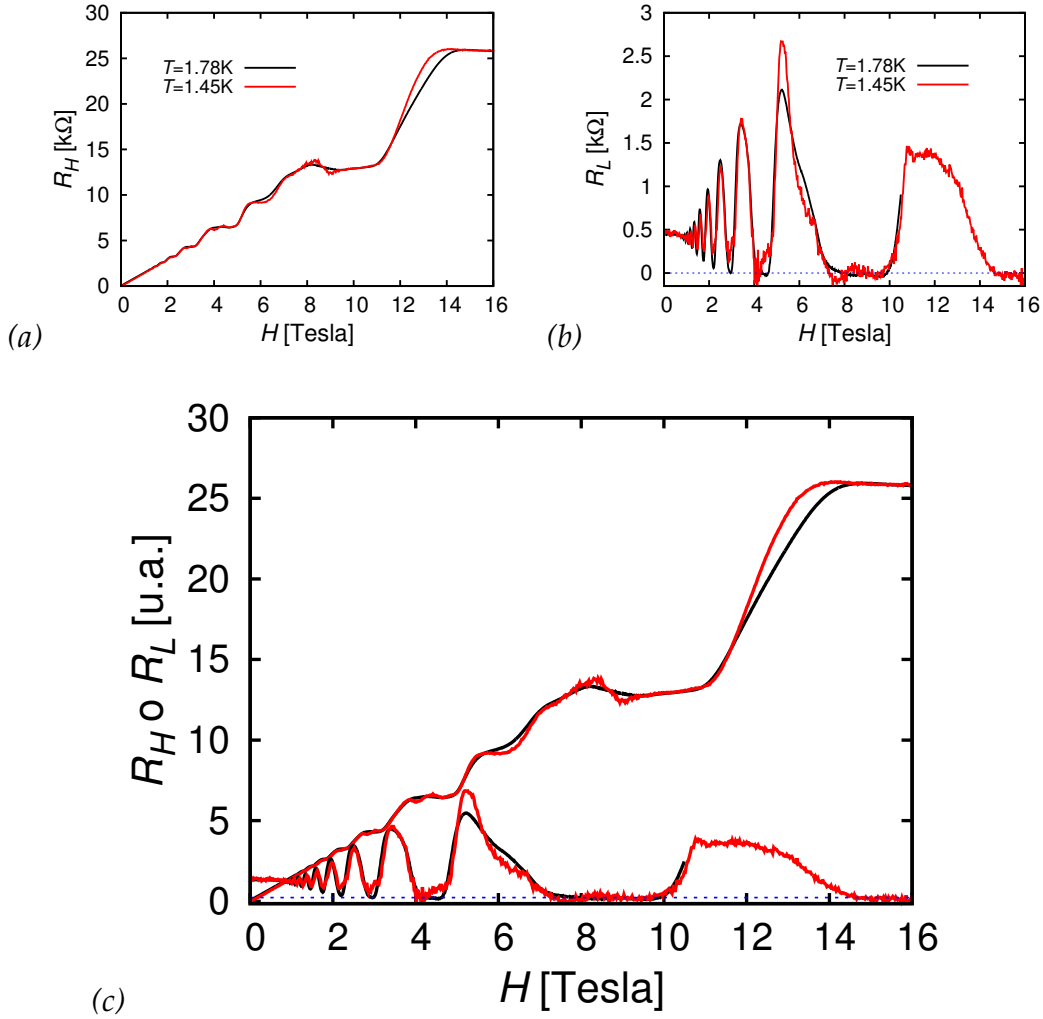


Figura 15.10: (a) Resistencia Hall, (b) resistencia longitudinal y (c) ambas en función del campo magnético a $T = 1.78\text{ K}$ (línea negra) y $T = 1.45\text{ K}$.

Para terminar presento acá por último otra tanda de mediciones a $T = 1.48\text{ K}$ en la Fig. 15.12 y a temperaturas de miliKelvin en la Fig. 15.13. En esta última es notorio que la cuantización de la resistencia Hall se observa a valores más pequeños de campo.

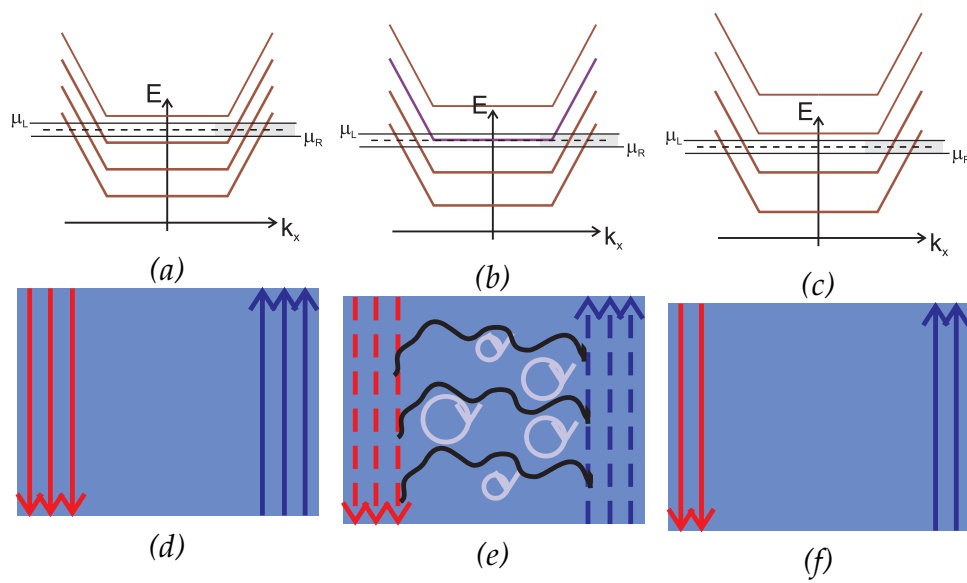


Figura 15.11: Transición entre plateaus: (a) Tres niveles de Landau se encuentran ocupados y hay (d) tres estados de borde. (b) El campo aumenta de manera que todos los estados localizados pueden ser ocupados y (e) los estados de los bordes están conectados mediante estos estados dando una resistencia finita. (c) Para un campo un poco mayor hay dos estados de Landau ocupados y por tanto (e) solo dos estados de borde.

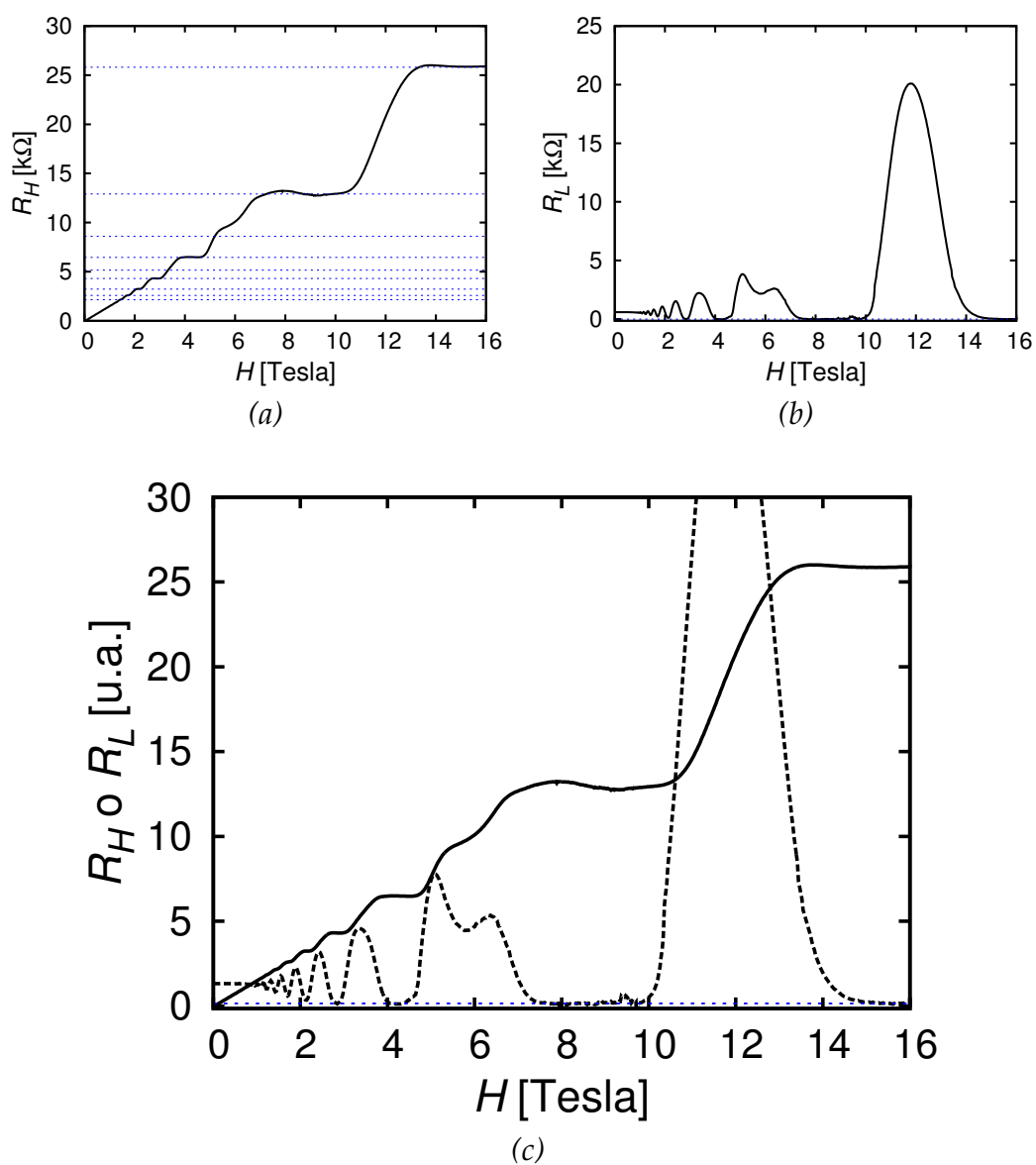


Figura 15.12: (a) Resistencia Hall, (b) resistencia longitudinal y (c) ambas en función del campo magnético a $T = 1.48$ K.

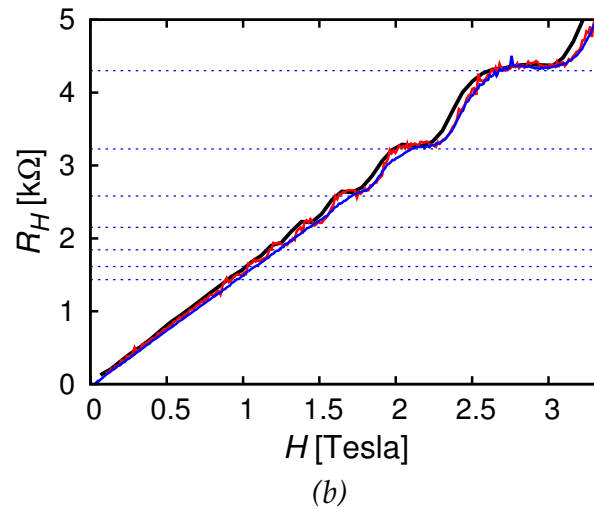
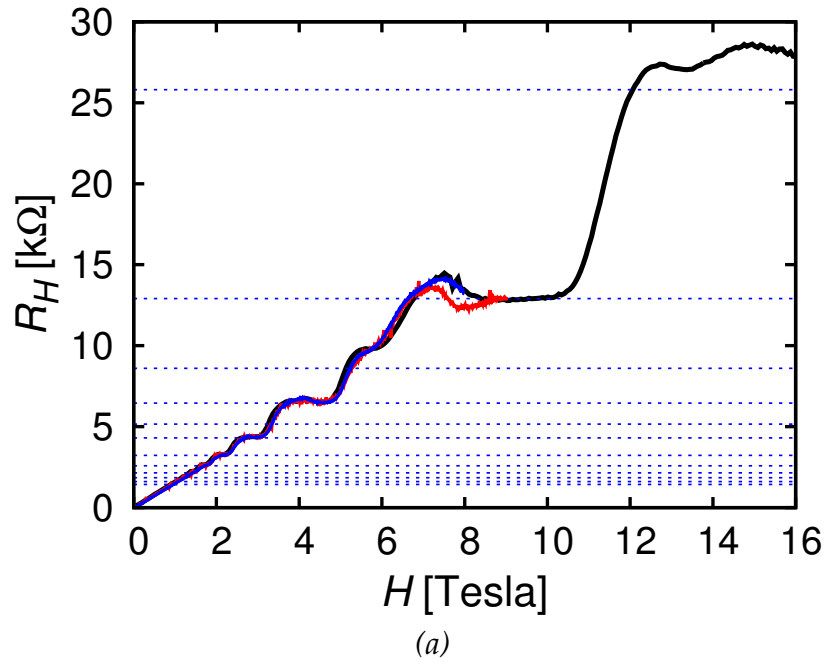


Figura 15.13: (a) Resistencia Hall en función del campo magnético a $T = 480 \text{ mK}$ (línea negra), $T = 35 \text{ mK}$ (línea roja) y $T = 50 \text{ mK}$ (línea azul). (b) Zoom a campos bajos.

Apéndice

La caja de herramientas de supervivencia

- A.1 Funciones de Green a temperatura cero.
- A.2 Introduciendo los diagramas.
- A.3 Ejemplo: el nivel resonante.
- A.4 Funciones de Green a temperatura finita.
- A.5 Ejemplo: la NCA.
- A.6 Funciones de Green de no-equilibrio.
- A.7 Ejemplo: el cálculo de la corriente.
- A.8 El límite no interactuante: la conexión a la transmisión.

A lo largo de la tesis hay un montón de referencias a funciones de Green, teoría de perturbaciones, desarrollos diagramáticos, ecuaciones de Dyson, etc. He incluido este capítulo para completar los ladrillos que faltan. La mayoría de las definiciones formales y algunas ecuaciones importantes se presentan aquí en detalle para evitar grandes desviaciones en la parte central del texto. He decidido dejar todo esto como un apéndice para facilitar la lectura de la tesis. También he incluido algunos ejemplos como complemento de cada presentación formal. Estos ejemplos han sido elegidos porque sirven como ilustración de la utilización de las herramientas teóricas y también porque conducen a resultados útiles. Creo que de esta manera este apéndice puede ser adecuado para un público más amplio. Uno de los ejemplos particulares presentados es la aproximación *non-crossing* (NCA). Se trata de una aproximación diagramática que hemos empleado para resolver nuestro modelo de interferencia para sistemas fuertemente correlacionados. Presento una derivación diagramática de la NCA en la Sec. A.5. Los detalles técnicos se dan en el **Apéndice B** y la extensión de la NCA fuera del equilibrio se discute en el **Apéndice C**.

La teoría de las funciones de Green de temperatura cero (Sec. A.1) se puede encontrar en varios libros de texto de física de muchos cuerpos. He seguido todo de los libros de Mahan [[Mahan, 2000](#)], Fetter y Walecka [[Fetter](#)

and Walecka, 2003] y Bruus y Flensberg [Bruus and Flensberg, 2004]. La presentación de las funciones de Green de temperatura finita en la Sec. A.4 se basa en este último. La teoría de perturbaciones fuera de equilibrio también se discute en varios libros. He seguido un libro de Lifshitz [E. M. Lifshitz, 1981] y también el de Mahan. He seguido también unas notas escritas por Alfredo Levy Yeyati [Yeyati, 2010]. El formalismo de Keldysh se introduce en la Sec. A.6.

A.1. Funciones de Green a temperatura cero

La función de Green de temperatura cero se define como

$$G_{i,j}(t, t') = -i\langle T c_i(t) c_j^\dagger(t') \rangle, \quad (\text{A.1})$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal, c_i representa la destrucción de una partícula (fermión o bosón) en el estado i y donde $\langle \rangle$ es el valor de expectación en el estado fundamental del Hamiltoniano H . Los operadores están en la representación de Heisenberg. Como suele ser el caso, no se conocen los auto-estados del Hamiltoniano completo. Sin embargo, este puede ser separado como $H = H_0 + V$, donde H_0 se puede resolver y V es tratado como una perturbación. En la representación de interacción (indicada con un sombrero), el operador de evolución

$$\hat{U}(t) = e^{iH_0 t} e^{-iH t},$$

se introduce para cambiar de los auto-estados y operadores en la representación de Heisenberg a la de interacción

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(t) &= e^{iH_0 t} e^{-iH t} \psi(0), \\ \hat{c}_i(t) &= e^{iH_0 t} c_i e^{-iH_0 t}, \end{aligned}$$

que satisfacen ecuaciones de evolución diferentes

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(t) &= -i\hat{V} \hat{\psi}(t), \\ \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_i(t) &= -i[\hat{c}_i(t), H_0]. \end{aligned}$$

En esta representación, dos estados de interacción en diferentes tiempos $\hat{\psi}(t) = \hat{S}(t, t') \hat{\psi}(t')$ están conectados por el **operador matriz S**,

$$\hat{S}(t, t') = \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t') = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t')} e^{-iH_0 t'}. \quad (\text{A.2})$$

Este operador satisface la ecuación diferencial $\partial_t \hat{S}(t, t') = -i\hat{V}(t) \hat{S}(t, t')$ con la condición inicial $\hat{S}(t, t) = 1$. La solución formal a esta ecuación es una serie ($t' = 0$)

$$\begin{aligned} \hat{S}(t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n T \left(\hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \right) \\ &= T \exp \left(-i \int_0^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

que da los sucesivos órdenes perturbativos.

Una expresión para la función de Green

La representación de interacción se vuelve realmente útil gracias al teorema de Gell-Man and Low [Gellmann and Low, 1951]. Es un resultado importante que relaciona el estado fundamental del sistema no perturbado al del Hamiltoniano completo. La idea es considerar que en $t \rightarrow -\infty$ la perturbación está apagada y el sistema está en el estado fundamental φ_0 . Durante el tiempo de evolución de este estado la perturbación se enciende adiabáticamente. Al tiempo t , el sistema se encuentra en el estado fundamental exacto

$$\hat{\psi}(t) = \hat{S}(t, -\infty)\varphi_0(0).$$

Por otra parte, se puede considerar que a medida que la evolución continúa la perturbación se apaga y en $t \rightarrow +\infty$ el estado del sistema es una vez más φ_0 a menos de un factor de fase

$$\varphi_0(0)e^{iL} = \hat{S}(+\infty, t)\hat{\psi}(t),$$

donde $e^{iL} = \langle \varphi_0 | \hat{S}(+\infty, t) | \hat{\psi}(t) \rangle = \langle \varphi_0 | \hat{S}(+\infty, t) \hat{S}(t, -\infty) | \varphi_0 \rangle = \langle \hat{S}(+\infty, -\infty) \rangle_0$. La expresión $\langle \rangle_0$ tiene que ser entendida como el valor de expectación en el estado fundamental no perturbado. La función de Green se puede calcular como

$$G_{i,j}(t, t') = -i \frac{\langle T \hat{S}(+\infty, -\infty) \hat{c}_i(t) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0}{\langle \hat{S}(+\infty, -\infty) \rangle_0} \quad (\text{A.4})$$

A.2. Introduciendo los diagramas

La función de Green puede obtenerse a diferentes órdenes utilizando el desarrollo en serie del operador matriz S de la Ec. (A.3) en la Ec. (A.4). A orden cero, el operador matriz S es la identidad, luego

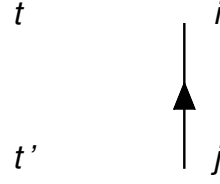
$$G_{i,j}^0(t, t') = -i \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0. \quad (\text{A.5})$$

Esto se llama **función de Green (o propagador) desnuda o no perturbada**. Dado que en la representación de interacción los operadores evolucionan en el tiempo con H_0 , este propagador se puede calcular, es decir, es algo conocido. Los propagadores desnudos juegan un papel importante como bloques de construcción para los diagramas de la teoría de perturbaciones. El propagador $G_{i,j}^0(t, t')$ puede ser representado diagramáticamente como en la Fig. A.1: una flecha desde t' a t , desde la creación del estado j a la destrucción del estado i .

El desarrollo del operador matriz S se puede considerar a un orden arbitrario, por ejemplo, para $n = 2$, la expresión que debe calcularse es algo así como

$$G_{i,j}^{(2)}(t, t') \sim -i \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle T \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \hat{c}_i(t) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0,$$

Figura A.1: Representación diagramática del propagador desnudo $G_{i,j}^0(t, t')$.



con un denominador

$$\text{denom} \sim \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \langle T \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \rangle_0.$$

Hay dos tiempos “externos” t y t' y muchos “tiempos internos”: t_1, t_2 , que corresponden al orden de la serie. La serie puede ser interpretada diagramáticamente como se muestra en la Fig. A.2. El propagador desnudo sufre procesos de dispersión de entre t' y t .

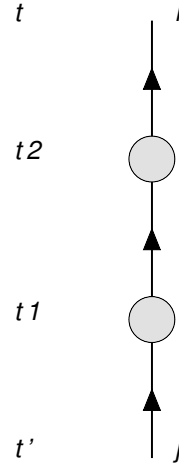


Figura A.2: Representación diagramática del segundo orden en el desarrollo en serie del propagador $G_{i,j}(t, t')$ para V genérico.

La perturbación V tiene que ser escrita en términos de operadores de creación y destrucción. Para hacer los siguientes puntos más claros, se considera una perturbación \hat{V} de la forma $U_{\lambda_1 \lambda_2} \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger \hat{c}_{\lambda_2}$. Esto puede ser también representado diagramáticamente como en la Fig. A.3. Esto se llama un **vértice**.



Figura A.3: Representación diagramática de una perturbación de la forma de $U_{\lambda_1 \lambda_2} \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger \hat{c}_{\lambda_2}$. Este es un vértice.

Los valores de expectación a ser evaluados son

$$\langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0,$$

multiplicado por un factor de $U_{\lambda_1 \lambda_2} U_{\lambda_3 \lambda_4}$, que cuantifica la importancia de esta contribución a la serie de perturbaciones. Es orden $\sim U^2$. Los valores esperados de este tipo pueden ser evaluados utilizando el teorema de

Wick [Wick, 1950]. De acuerdo con este teorema, estos valores de expectativa pueden calcularse como la suma de todas las posibles “contracciones”. Una **contracción** es el valor esperado de un par de operadores ordenados temporalmente, un operador de creación actuando primero y luego el operador destrucción ¹, excepto cuando actúan al mismo tiempo. En este caso que se tomó como ejemplo hay tres operadores de cada tipo y por lo tanto seis posibles contracciones

$$\begin{aligned}
 (a) & \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \\
 (b) & \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \\
 (c) & \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_3}(t_2) \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \rangle_0 \\
 (d) & \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \rangle_0 \\
 (e) & \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \\
 (f) & \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0
 \end{aligned}$$

Estas contracciones se pueden representar diagramáticamente como en la Fig. A.4.

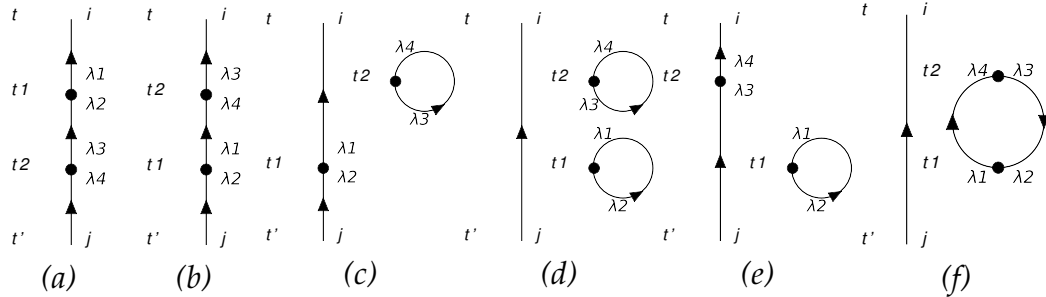


Figura A.4: Representación diagramática de las seis posibles contracciones (a)-(f) en el segundo orden del desarrollo perturbativo para una perturbación de la forma $U_{\lambda_1 \lambda_2} \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger \hat{c}_{\lambda_2}$.

El desarrollo perturbativo se puede interpretar como una corrección sucesiva de la función de Green desnuda que conecta $t' \rightarrow t$ con “eventos de dispersión” en tiempos intermedios. Para cada orden, estos procesos se pueden representar con diagramas, los **diagramas de Feynman**. Una contracción de los operadores que actúan en diferentes momentos se puede identificar con una función de Green desnuda. A partir de esta representación está claro por qué se les llama también propagadores. Una contracción de los operadores que actúan al mismo tiempo se puede identificar con un operador de número. Los diagramas son convoluciones en el tiempo (productos en frecuencia) de propagadores no perturbados u operadores de nú-

¹Esto se llama orden normal

mero. La expresión analítica de los diagramas (b) y (c) es

$$G_{i,j}^{(2)}(t, t')(\text{b})+(\text{c}) \sim U_{\lambda_1, \lambda_2} U_{\lambda_3, \lambda_4} \left[G_{\lambda_i, \lambda_3}^{(0)}(t, t_2) G_{\lambda_4, \lambda_1}^{(0)}(t_2, t_1) G_{\lambda_2, j}^{(0)}(t_1, t') \right. \\ \left. + G_{\lambda_i, \lambda_1}^{(0)}(t, t_1) G_{\lambda_2, j}^{(0)}(t_1, t') (-i) \langle T \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0 \right],$$

donde una suma sobre las variables internas $\sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4}$ tiene que ser calculado y también una integración $\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2$.

Dado que hay una suma implícita sobre los grados de libertad internos λ_i y dado que los tiempos internos t_1 y t_2 son variables de integración, de las seis contribuciones, (a) y (b) representan el mismo proceso. Lo mismo es cierto para (c) y (e). Hay un factor $2!$ debido a la permutación de las variables de tiempos internos que anula el factor de la serie exponencial. Los dos primeros diagramas se llaman **diagramas conectados** y los otros, (c) - (f) son **diagramas desconectados**. El desarrollo perturbativo a segundo orden para el numerador y el denominador de la Ec. (A.4) se muestra en la Fig. A.5. He omitido las etiquetas.

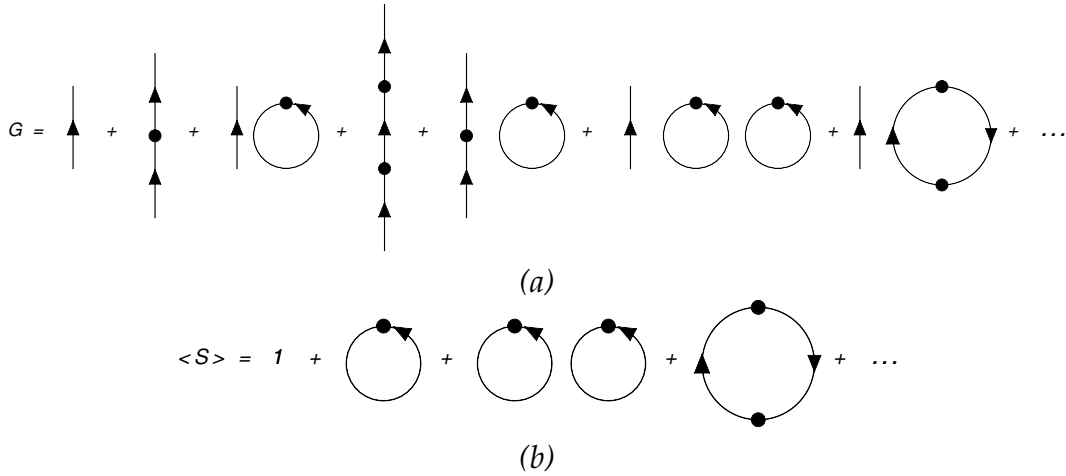


Figura A.5: Desarrollo diagramático a segundo orden para (a) el numerador de la función de Green y (b) el operador de la matriz S en el denominador de la Ec. (A.4). Las etiquetas se han omitido.

Hay una propiedad interesante que se puede demostrar re-ordenando los diagramas. Para ello, es mejor considerar el dominio de frecuencia al que se puede acceder mediante una transformada de Fourier. En este ámbito, la expresión analítica que representa cada diagrama es un producto de propagadores. El re-ordenamiento del numerador se muestra en la Fig. A.6.

El desarrollo perturbativo del operador matriz S puede ser reconocido en el factor común entre paréntesis. Este factor anula el denominador. Esto se llama **la cancelación de diagramas desconectados**. La serie perturbativa se puede hacer para un orden arbitrario usando diagramas de Feynman. Para la expansión diagramática de la función de Green sólo tienen que ser

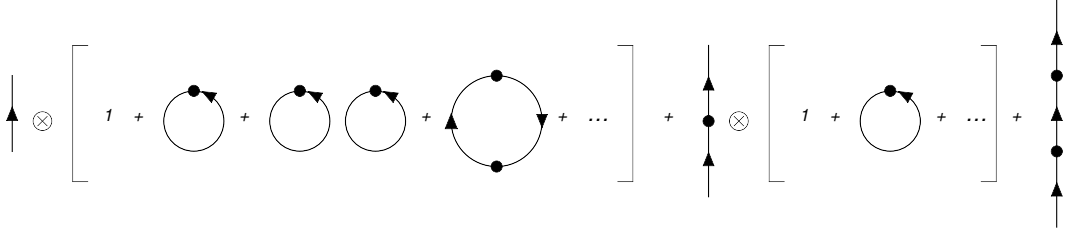


Figura A.6: Re-ordenamiento del desarrollo diagramático a segundo orden para que el numerador de la función de Green de la Ec. (A.4).

tenidos en cuenta los **diagramas conectados y topológicamente diferentes**

$$G_{i,j}(t, t') = -i \sum_n (-i)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle T \hat{c}_i(t) \hat{V}(t_1) \cdots \hat{V}(t_n) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0. \quad (\text{A.6})$$

La serie diagramática a segundo orden se muestra en la Fig. A.7.

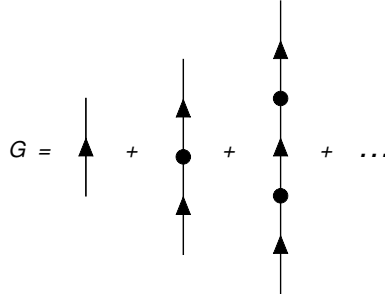


Figura A.7: Desarrollo diagramático de la función de Green a segundo orden, considerando sólo los diagramas conectados y topológicamente diferentes.

Como se señaló, en el dominio de frecuencia la convolución de las funciones de Green en el tiempo puede ser sustituido por un producto de propagadores. En el caso de $G_{i,j}$ que depende de t, t' como $(t - t')$, la transformada de Fourier resulta

$$G_{i,j}(t - t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} G_{i,j}(\omega),$$

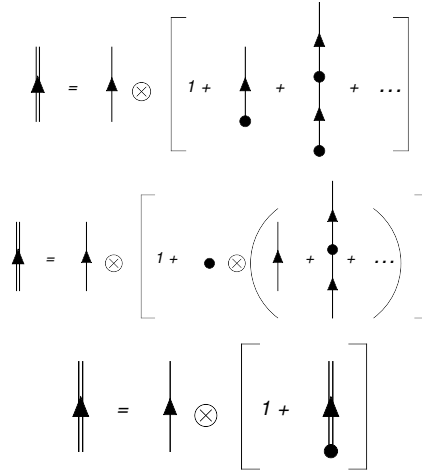
$$G_{i,j}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} G_{i,j}(t).$$

Un desarrollo como el de la Fig. A.7 se puede expresar como

$$\begin{aligned} G(\omega) &= G^0 + G^0 V G^0 + G^0 V G^0 V G^0 + \cdots \\ &= G^0 [1 + V G^0 + V G^0 V G^0 + \cdots] \\ &= G^0 [1 + V (G^0 + G^0 V G^0 + \cdots)] \\ &= G^0 [1 + V G] \\ \Rightarrow G(\omega) &= G^0 [1 - V G^0]^{-1}, \end{aligned}$$

donde la interacción representada por V se llama **auto-energía** Σ . Como se muestra en la Fig. A.8, estas operaciones se pueden realizar directamente con los diagramas.

Figura A.8: Derivación diagramática de la ecuación de Dyson. La flecha de doble línea representa la función de Green vestida.



Formalmente,

$$G_{i,j}(\omega) = \frac{G_{i,j}^0(\omega)}{1 - \Sigma_{i,j}(\omega)G_{i,j}^0(\omega)}, \quad (\text{A.7})$$

y el problema es el cálculo de la auto-energía. Esta expresión se llama **ecuación de Dyson**.

A.3. Ejemplo: El nivel resonante

Como ejemplo de la aplicación de los desarrollos diagramáticos presento aquí el análisis del problema de un solo nivel localizado acoplado a un baño de electrones de conducción. Esto se conoce como el problema del nivel resonante y es un límite del modelo de Anderson para el problema de la impureza [Anderson, 1961] sin repulsión de Coulomb. El Hamiltoniano completo

$$H_A^{U=0} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + H.c. \right),$$

donde $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) crea (destruye) un electrón de conducción con momento k y espín σ , d_{σ}^\dagger (d_{σ}) es el operador de creación (destrucción) de los electrones en el nivel localizado con energía E_d y $V_{k\sigma}$ es la hibridación. El Hamiltoniano se puede separar como $H_0 + H_1$, donde

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma},$$

describe el baño de electrones y nivel localizado aislados; y

$$H_1 = \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + H.c. \right), \quad (\text{A.8})$$

puede ser tratada como una perturbación que describe los procesos en los que los electrones saltan de la banda de conducción y ocupan el nivel localizado, y también lo contrario.

Teniendo en cuenta la definición de la Ec. (A.1), hay tres funciones de Green para ser calculadas: *i*) una para el nivel localizado

$$G_d(t, t') = -i\langle T_\sigma d_\sigma^\dagger(t) d(t') \rangle,$$

ii) una para el baño de electrones

$$G_{k,k'}(t, t') = -i\langle T c_{k\sigma}(t) c_{k'\sigma}^\dagger(t') \rangle,$$

y *iii*) dos para la mezcla

$$\begin{aligned} G_{k,d}(t, t') &= -i\langle T c_{k\sigma}(t) d_\sigma^\dagger(t') \rangle, \\ G_{d,k}(t, t') &= -i\langle T d_\sigma(t) c_{k\sigma}^\dagger(t') \rangle. \end{aligned}$$

De acuerdo con estas definiciones, las funciones de Green no perturbadas son

$$\begin{aligned} G_d^0(t, t') &= -i\langle T \hat{d}_\sigma(t) \hat{d}_\sigma^\dagger(t') \rangle_0, \\ G_{k,k'}^0(t, t') &= -i\langle T \hat{c}_{k\sigma}(t) \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger(t') \rangle_0, \\ G_{k,d}^0(t, t') &= -i\langle T \hat{c}_{k\sigma}(t) \hat{d}_\sigma^\dagger(t') \rangle_0, \\ G_{d,k}^0(t, t') &= -i\langle T \hat{d}_\sigma(t) \hat{c}_{k\sigma}^\dagger(t') \rangle_0. \end{aligned}$$

Los dos primeros propagadores están representados en la Fig. A.9(a). Las funciones de Green no perturbadas para los electrones de conducción (localizados) se representan con una flecha de línea discontinua (línea continua). Los propagadores vestidos están representados con una flecha de línea doble como se muestra en la Fig. A.9(b).



Figura A.9: Representación diagramática de los propagadores (a) desnudos y (b) vestidos de electrones localizados y de conducción.

La función de Green desnuda para los electrones localizados

Dado H_0 , la parte que describe el nivel localizado es $E_d d_\sigma^\dagger d_\sigma$, que es diagonal. Los auto-estados son $\{|0_d\rangle, |\uparrow_d\rangle, |\downarrow_d\rangle, |\uparrow\downarrow_d\rangle\}$ con autoenergías $\{0, E_d, E_d, 2E_d\}$. A partir de la definición,

$$G_d^0(t, t') = (-i) \left[\theta(t - t') \langle \hat{d}_\sigma(t) \hat{d}_\sigma^\dagger(t') \rangle_0 - \theta(t' - t) \langle \hat{d}_\sigma^\dagger(t') \hat{d}_\sigma(t) \rangle_0 \right],$$

donde el signo menos es una consecuencia del carácter fermiónico de los operadores. Teniendo en cuenta que $|\rangle_0$ es el estado vacío $|0_d\rangle$, la única contribución proviene del término con el operador de creación actuando primero. Escribiendo explícitamente los operadores en la representación de interacción

$$\begin{aligned} G_d^0(t, t') &= (-i)\theta(t - t') \langle e^{iH_0 t} d_\sigma e^{-iH_0(t-t')} d_\sigma^\dagger e^{-iH_0 t'} \rangle_0 \\ &= (-i)\theta(t - t') e^{-iE_d(t-t')}. \end{aligned}$$

Este es el resultado de la función de Green no perturbada en el dominio temporal. El propagador desnudo depende solamente de $t - t'$ y es útil encontrar el resultado en el dominio de frecuencia. Se puede calcular mediante una transformada de Fourier usando la representación espectral de la función de Heaviside

$$G_d^0(\omega) = (-i) \int dt \theta(t) e^{-i(E_d - \omega)t} = (-i) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int dt \frac{1}{2\pi i} \int ds \frac{e^{-i(E_d - \omega)t} e^{ist}}{s - i\eta}.$$

La integral

$$\int ds \frac{e^{-i(E_d - \omega - s)t}}{s - i\eta},$$

se puede resolver utilizando las técnicas de variable compleja.

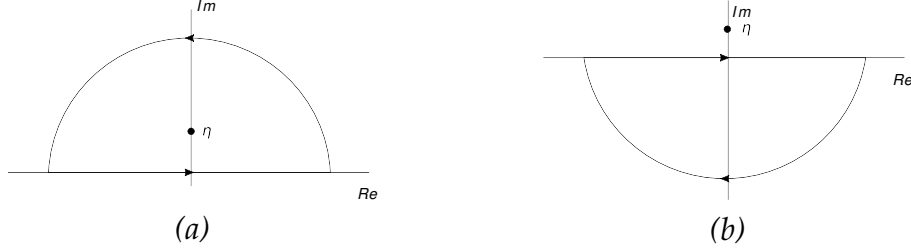


Figura A.10: Contornos de integración posibles para (a) $t > 0$ y (b) $t < 0$.

Para $t > 0$, la función $h(z) = \frac{e^{-i(E_d - \omega - z)t}}{z - i\eta}$ puede ser evaluada a lo largo de una curva semicircular en la parte superior del plano complejo (véase la Fig. A.10(a)). De un lado, la integral

$$\oint h(z) dz = 2\pi i \text{Res}(h(z)),$$

donde $\text{Res}(h(z))$ son los residuos de $h(z)$ dentro del dominio. Hay un polo simple en $z_0 = i\eta$, por lo tanto,

$$\oint h(z) dz = 2\pi i e^{-i(E_d - \omega - i\eta)t}.$$

Por el otro lado, la integral a lo largo del contorno tiene dos contribuciones: la integral a lo largo de la parte curva del contorno y la integral a lo largo

del eje real. La primera puede hacerse despreciable extendiendo el radio del contorno a infinito, el que queda es el que coincide con la integral real que se necesita. Por ende,

$$\int ds \frac{e^{-i(E_d - \omega - s)t}}{s - i\eta} = 2\pi i e^{-i(E_d - \omega - i\eta)t},$$

para $t > 0$. Para $t < 0$, el contorno de integración puede ser cerrado en la parte inferior del plano complejo (véase la Fig. A.10(b)). Dado que no existen polos, la integral da cero. De este modo,

$$\begin{aligned} G_d^0(\omega) &= (-i) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^\infty dt e^{-i(E_d - \omega - i\eta)t} \\ \Rightarrow G_d^0(\omega) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega + i\eta - E_d}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Este es el propagador desnudo para el nivel localizado. Este propagador tiene la información del efecto de una perturbación **después** de que se crea, es decir, la parte de la función de Green que corresponde a $t > 0$. Se llama función de Green **retardada**. La otra parte es la función de Green **avanzada**. La retardada se ha obtenido reemplazando $\omega \rightarrow \omega + i\eta$ y tomando $\eta \rightarrow 0^+$. Para la avanzada, es necesario cambiar $\omega \rightarrow \omega - i\eta$ y luego tomar el límite. Es por eso que me refiero a la definición de la Ec. (A.1) simplemente como la función de Green.

La función de Green para los electrones de conducción

La parte del Hamiltoniano que describe los electrones de conducción es $\sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$, que también está en una forma diagonal. El estado fundamental se construye con los estados de un electrón $|k\sigma\rangle = c_{k\sigma}^\dagger |\text{vac}\rangle$, llenando todos los estados hasta el nivel de Fermi ϵ_F (que define un momento de Fermi k_F), $|FS\rangle = \prod_{k < k_F} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger |\text{vac}\rangle$. Las energías pueden ser medidas desde el nivel de Fermi $\xi_k = \epsilon_k - \epsilon_F$.

A partir de la definición de la función de Green

$$G_{k,k'}^0(t, t') = (-i) \left[\theta(t - t') \langle \hat{c}_{k\sigma}(t) \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger(t') \rangle_0 - \theta(t' - t) \langle \hat{c}_{k'\sigma}^\dagger(t') \hat{c}_{k\sigma}(t) \rangle_0 \right],$$

y reemplazando el estado fundamental para el mar de Fermi $|FS\rangle$ (de energía E_0) y escribiendo de forma explícita los operadores en la representación de interacción,

$$\begin{aligned} G_{k,k'}^0(t, t') &= (-i) \theta(t - t') e^{iE_0(t-t')} \langle FS | c_{k\sigma} e^{-iH_0(t-t')} c_{k'\sigma}^\dagger | FS \rangle \\ &\quad - (-i) \theta(t' - t) e^{iE_0(t'-t)} \langle FS | c_{k'\sigma}^\dagger e^{-iH_0(t'-t)} c_{k\sigma} | FS \rangle. \end{aligned}$$

La creación de un electrón en el mar de Fermi sólo es posible si ese estado está vacío. La destrucción sólo es posible si está ocupado el estado,

$$\begin{aligned} c_{k\sigma}^\dagger |FS\rangle &= \theta(\xi_k) c_{k\sigma}^\dagger |FS\rangle, \\ c_{k\sigma} |FS\rangle &= (1 - \theta(\xi_k)) c_{k\sigma} |FS\rangle. \end{aligned}$$

Por otra parte, el estado creado tiene que ser destruido después o el valor de expectación daría cero (porque serían estados ortogonales). Lo mismo para la destrucción. Por ende,

$$\begin{aligned} G_{k,k'}^0(t, t') &= (-i)\theta(t - t')e^{iE_0(t-t')}\delta_{k,k'}\theta(\xi)e^{-i(E_0+\xi_k)(t-t')} \\ &\quad - (-i)\theta(t' - t)e^{iE_0(t'-t)}\delta_{k,k'}(1 - \theta(\xi_k))e^{-i(E_0-\xi_k)(t'-t)} \\ \Rightarrow G_{k,k'}^0(t - t') &= (-i)\delta_{k,k'} \left[\theta(t - t')\theta(\xi_k)e^{-i\xi_k(t-t')} - \theta(t' - t)\theta(-\xi_k)e^{i\xi_k(t'-t)} \right]. \end{aligned}$$

Este es el resultado de la función de Green desnuda de los electrones de conducción en el dominio temporal. La transformada de Fourier

$$G_{k,k'}^0(\omega) = (-i)\delta_{k,k'} \int dt \left[\theta(t)\theta(\xi_k)e^{-i(\xi_k-\omega)t} - \theta(t)\theta(-\xi_k)e^{-i(\xi_k-\omega)t} \right],$$

se puede calcular añadiendo una parte imaginaria $\pm i\eta$ ($\eta \rightarrow 0^+$) infinitesimal como se hizo para la función de Green del nivel localizado,

$$\begin{aligned} G_{k,k'}^0(\omega) &= (-i)\delta_{k,k'} \left[\theta(\xi_k) \int_0^\infty dt e^{-i(\xi_k-\omega-i\eta)t} - \theta(-\xi_k) \int_{-\infty}^0 dt e^{-i(\xi_k-\omega+i\eta)t} \right] \\ \Rightarrow G_{k,k'}^0(\omega) &= \delta_{k,k'} \left[\frac{\theta(\xi_k)}{\omega + i\eta - \xi_k} + \frac{\theta(-\xi_k)}{\omega - i\eta - \xi_k} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Este es el resultado para los electrones de conducción que incluye los electrones y los agujeros por encima y por debajo del nivel de Fermi.

Los propagadores desnudos

Dado que H_0 no contiene ningún término que mezcla el nivel localizado con el baño de electrones, el conjunto de propagadores desnudas resultante es

$$\begin{aligned} G_d^0(\omega) &= \frac{1}{\omega + i\eta - E_d}, \\ G_{k,k'}^0(\omega) &= \delta_{k,k'} \left[\frac{\theta(\xi_k)}{\omega + i\eta\xi_k} + \frac{\theta(-\xi_k)}{\omega - i\eta\xi_k} \right], \\ G_{k,d}^0(\omega) &= G_{d,k}^0(\omega) = 0. \end{aligned}$$

La serie diagramática

El Hamiltoniano se separó como $H = H_0 + H_1$, donde H_1 de la Ec. (A.8) se trata como una perturbación. Contiene términos de la forma $V_{k\sigma}c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma$ que describen el salto de un electrón del nivel localizado al baño de conducción y $V_{k\sigma}^*d_\sigma^\dagger c_{k\sigma}$ que describen el proceso contrario. Estos son los vértices de este problema y se ilustran en la Fig. A.11.

La función de Green perturbada puede ser calculada a cualquier orden sumando los diagramas posibles conectados y topológicamente diferentes

Figura A.11: Vértices de la perturbación H_1 en la Ec. (A.8). (a) Un electrón es destruido en el nivel localizado y creado en la banda de conducción. (b) El proceso opuesto.

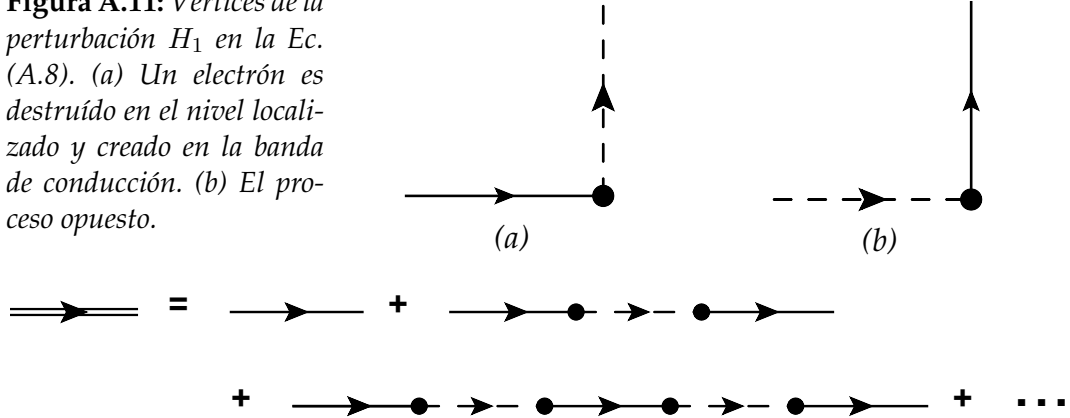


Figura A.12: Desarrollo diagramático para el problema del nivel resonante.

que se pueden formar compatibles con los vértices. Para la función de Green del nivel localizado $G_d(\omega)$, esto se muestra en la Fig. A.12.

Por la forma de la perturbación, sólo hay diagramas con un número par de vértices. Estos diagramas se toman directamente en el dominio de frecuencia, de ahí que se puedan leer como un producto de propagadores. Es posible trabajar con esta expansión para llegar a la ecuación de Dyson como se muestra en la Fig. A.13.

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow &= \rightarrow \otimes \left[1 + \bullet \rightarrow \bullet \rightarrow + \bullet \rightarrow \bullet \rightarrow \bullet \rightarrow + \dots \right] \\
 &= \rightarrow \otimes \left[1 + \bullet \rightarrow \bullet \otimes \left(\rightarrow + \rightarrow \bullet \rightarrow \bullet \rightarrow + \dots \right) \right] \\
 \Rightarrow &= \rightarrow \otimes \left[1 + \bullet \rightarrow \bullet \Rightarrow \right]
 \end{aligned}$$

Figura A.13: Factorización en la serie de diagramas para el problema del nivel resonante con el objetivo de derivar la ecuación de Dyson.

La expresión analítica para la ecuación de Dyson en la Fig. A.13 es

$$G_d(\omega) = G_d^0(\omega) + \sum_k G_d^0(\omega) V_{k\sigma} G_{k,k}^0(\omega) V_{k\sigma}^* G_d(\omega),$$

que puede ser escrito como

$$G_d(\omega) = G_d^0(\omega) + G_d^0(\omega) \left(\sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_{k,k}^0(\omega) \right) G_d(\omega),$$

donde la auto-energía puede ser reconocida fácilmente

$$\Sigma(\omega) = \sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_{k,k}^0(\omega), \quad (\text{A.11})$$

por lo tanto, $G_d(\omega) = G_d^0(\omega) + G_d^0(\omega)\Sigma(\omega)G_d(\omega)$, y

$$G_d(\omega) = \frac{G_d^0(\omega)}{1 - G_d^0(\omega)\Sigma(\omega)} = \frac{1}{(G_d^0(\omega))^{-1} - \Sigma(\omega)}.$$

Utilizando el resultado de la función de Green desnuda de la Ec. (A.9), la función de Green retardada es

$$G_d^r(\omega) = \frac{1}{\omega - E_d - \Sigma^r(\omega)}. \quad (\text{A.12})$$

El infinitesimal η se ha omitido aquí porque la parte imaginaria de la auto-energía se encarga de la convergencia. Usando la expresión de la Ec. (A.10) para la función de Green desnuda de los electrones de conducción en la Ec. (A.11), la auto-energía retardada es

$$\Sigma^r(\omega) = \sum_{k>k_F} \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega + i\eta - \epsilon_k}, \quad (\text{A.13})$$

tomando $\epsilon_F = 0$.

La densidad local de estados

La densidad de estados para el nivel localizado puede calcularse a partir de la función de Green

$$\rho_d(\omega) = \frac{1}{2\pi i} (G_d^a - G_d^r)(\omega), \quad (\text{A.14})$$

donde las funciones de Green avanzadas y retardadas en la mayoría de los casos satisfacen $G_d^{a*}(\omega) = G_d^r(\omega)$, por lo que $\rho_d(\omega) = \frac{-1}{\pi} G_d^{\mathbb{I}r}(\omega)$. La auto-energía de la Ec. (A.13) se puede separar en parte real e imaginaria: $\Sigma^r(\omega) = \Sigma^{\mathbb{R}r}(\omega) + i\Sigma^{\mathbb{I}r}(\omega)$.

De acuerdo con esto, la parte imaginaria de la función de Green en la Ec. (A.12) resulta

$$G_d^{\mathbb{I}r}(\omega) = \frac{\Sigma^{\mathbb{I}r}(\omega)}{(\omega - E_d - \Sigma^{\mathbb{R}r}(\omega))^2 + (\Sigma^{\mathbb{I}r}(\omega))^2}. \quad (\text{A.15})$$

Trabajando de forma explícita en la auto-energía de la Ec. (A.13)

$$\Sigma^r(\omega) = \sum_{k>k_F} |V_{k\sigma}|^2 \frac{(\omega - \epsilon_k) - i\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2},$$

y tomando el límite de $\eta \rightarrow 0^+$, la parte real da

$$\Sigma^{\mathbb{R}r}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{k>k_F} |V_{k\sigma}|^2 \frac{(\omega - \epsilon_k)}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2} = \wp \sum_{k>k_F} \frac{|V_{k\sigma}|^2}{(\omega - \epsilon_k)},$$

donde \wp es el valor principal. Teniendo en cuenta que $\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \pi \delta(x)$, la parte imaginaria resulta

$$\Sigma^{\mathbb{I}r}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{k > k_F} |V_{k\sigma}|^2 \frac{-\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2} = -\pi \sum_{k > k_F} |V_{k\sigma}|^2 \delta(\omega - \epsilon_k).$$

Definiendo la **función Delta**

$$\Delta_\sigma(\omega) = \pi \sum_{k > k_F} |V_{k\sigma}|^2 \delta(\omega - \epsilon_k), \quad (\text{A.16})$$

el resultado para la parte imaginaria de la función de Green en la Ec. (A.15) es

$$G_d^{\mathbb{I}r}(\omega) = \frac{-\Delta_\sigma(\omega)}{(\omega - \tilde{E}_D)^2 + (\Delta_\sigma(\omega))^2},$$

y la densidad local de estados del nivel localizado

$$\rho_d(\omega) = \frac{\Delta_\sigma(\omega)/\pi}{(\omega - \tilde{E}_d)^2 + \Delta_\sigma^2(\omega)}, \quad (\text{A.17})$$

donde $\tilde{E}_d = E_d + \Sigma^{\mathbb{R}r}(\omega)$.

Si el acoplamiento es independiente del impulso $V_{k\sigma} = V$, $\Delta_\sigma(\omega) = \pi \rho_{\text{baño}}(\omega) V^2$, donde $\rho_{\text{baño}}(\omega) = \sum_{k > 0} \delta(\omega - \epsilon_k)$ es la densidad de estados por espín de los electrones de conducción. Tomando su valor en el nivel de Fermi, $\rho_{\text{baño}}(0) = \rho_0$, Δ_σ es independiente de la frecuencia y la densidad local de estados es

$$\rho_d(\omega) = \frac{\Delta_\sigma/\pi}{(\omega - \tilde{E}_d)^2 + \Delta_\sigma^2}.$$

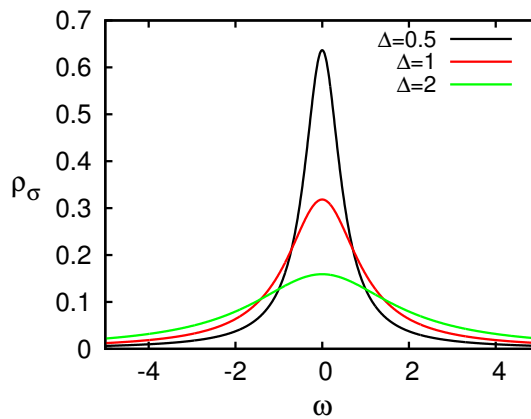


Figura A.14: Densidad de estados en el problema del nivel resonante para varios valores de Δ . E_d se fija en cero.

La densidad de estados se muestra en la Fig. A.14 para varios valores de Δ . Tiene forma de Lorentziana y un ancho de $2\Delta_\sigma$. La hibridación del nivel localizado con el baño de electrones se cuantifica con el **ancho del**

nivel resonante Δ . En el límite de $\Delta = 0$, la densidad de estados tiende a una función delta que corresponde a un nivel aislado. Cuando el nivel está acoplado a un baño de electrones de conducción, adquiere una vida media finita dado que un electrón que ocupa este estado puede escapar al baño de conducción.

A.4. Funciones de Green a temperatura finita

Hay una forma inteligente de extender la teoría de perturbaciones a temperatura finita T . Esto es obligatorio en los sistemas de materia condensada donde $T \neq 0$. El cambio importante es que los valores de expectación deben ser calculados en presencia de un reservorio de temperatura. Y más en general, también en la presencia de un reservorio de potencial químico. Esto significa que los valores de expectación se deben calcular en el ensamble gran canónico. Para este propósito, es necesario introducir la matriz densidad. El factor de Boltzmann $e^{\beta H}$ en la matriz densidad, donde $\beta = 1/T$ en unidades de la constante de Boltzmann, hace que sea bastante complicado hacer un desarrollo perturbativo ya que también hay términos e^{iHt} que provienen de la evolución temporal. Ambas exponenciales pueden ser tratadas en pie de igualdad con la introducción de un tiempo imaginario $\tau = it$ y frecuencias imaginarias $i\omega$. Las funciones de Green definidas en el tiempo imaginario se llaman **funciones de Green de Matsubara**. Las funciones de Green retardadas y avanzadas pueden ser recuperadas de la función de Green de Matsubara por un proceso de prolongación analítica.

La función de Green de temperatura finita se define como

$$G_{i,j}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') \rangle, \quad (\text{A.18})$$

donde T_τ es el operador de ordenamiento de tiempos imaginarios y se define como

$$T_\tau c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') = \theta(\tau - \tau') c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') \pm \theta(\tau' - \tau) c_j^\dagger(\tau') c_i(\tau),$$

con $+$ ($-$) para los operadores bosónicos (fermiónicos). Los operadores están en la representación de Heisenberg y el valor de expectación se toma en el ensamble gran canónico

$$G_{i,j}(\tau, \tau') = -\frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta K} T_\tau (c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau')) \right]}{\text{Tr} [e^{-\beta K}]}.$$

El operador K se define como $K = H - \mu N$, donde H es el Hamiltoniano y N es el número total de partículas; μ es el potencial químico. La traza tiene que ser tomada en una base completa de estados.

Algunas propiedades de las funciones de Green de Matsubara:

- (i) Estas funciones de Green dependen sólo de la diferencia de $\tau - \tau'$,

$$G_{i,j}(\tau, \tau') = G_{i,j}(\tau - \tau').$$

(ii) Se puede demostrar que la convergencia está garantizada si

$$-\beta < \tau - \tau' < \beta.$$

(iii) Hay una “periodicidad” que surge de la propiedad cíclica de la traza,

$$G_{i,j}(\tau + \beta) = \pm G_{i,j}(\tau),$$

donde $+$ ($-$) es para bosones (fermiones).

Teniendo en cuenta la periodicidad en los tiempos imaginarios es posible introducir una transformada de Fourier

$$G_{i,j}(n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(\tau), \quad (\text{A.19})$$

$$G_{i,j}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(n), \quad (\text{A.20})$$

para trabajar en el dominio de las frecuencias imaginarias $i\frac{n\pi}{\beta}$. Usando las propiedades, esto también puede simplificarse,

$$\begin{aligned} G_{i,j}(n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 d\tau e^{i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(\tau) + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(\tau) \\ &= e^{-in\pi} \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(\tau - \beta) + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(\tau) \\ &= (1 \pm e^{-in\pi}) \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\frac{n\pi}{\beta}\tau} G_{i,j}(\tau). \end{aligned}$$

Para fermiones, las contribuciones no nulas corresponden a n impar y para bosones, que a n par. Por ende

$$G_{i,j}(i\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau} G_{i,j}(\tau), \text{ con } \begin{cases} \omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}, \text{ bosones} \\ \omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \text{ fermiones} \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Las frecuencias imaginarias $i\omega_n$ se pueden clasificar como **fermiónicas** cuando $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ o **bosónicas** cuando $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$.

La conexión con las funciones de Green avanzadas y retardadas

En la Sec. A.3 se demostró que las funciones de Green retardadas y avanzadas pueden obtenerse a partir de la función de Green ordenada temporalmente definida en la Ec. (A.1) mediante la transformación de Fourier y el cambio de $\omega \rightarrow \omega \pm i\eta$, con $\eta \rightarrow 0^+$ y el signo más (menos) correspondientes a las funciones de Green retardadas (avanzadas). La función de Green retardada para fermiones también se puede definir como

$$G_{i,j}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_i(t), c_j^\dagger(t')\} \rangle, \quad (\text{A.22})$$

donde $\{, \}$ es el anti-conmutador. Con el fin de mostrar cómo las funciones de Green retardadas y avanzadas se pueden recuperar de las funciones de Green de la Matsubara es conveniente introducir la **representación Lehmann**. Teniendo en cuenta la función de Green diagonal

$$G_i^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{c_i(t), c_i^\dagger(t')\} \rangle,$$

que puede escribirse explícitamente como

$$G_i(t, t') = -i\theta(t - t') \left[\langle c_i(t) c_i^\dagger(t') \rangle + \langle c_i^\dagger(t') c_i(t) \rangle \right].$$

Cada uno de estos términos se puede evaluar teniendo en cuenta una base completa $\{|n\rangle\}$ de auto-estados de H

$$\begin{aligned} \langle c_i(t) c_i^\dagger(t') \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} e^{iHt} c_i e^{-iH(t-t')} c_i^\dagger e^{-iHt'} | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} e^{iE_n(t-t')} \langle n | c_i e^{-iH(t-t')} c_i^\dagger | n \rangle, \end{aligned}$$

introduciendo la identidad $1 = \sum_n |n\rangle \langle n|$,

$$\begin{aligned} \langle c_i(t) c_i^\dagger(t') \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{n, n'} e^{-\beta E_n} e^{iE_n(t-t')} \langle n | c_i e^{-iH(t-t')} | n' \rangle \langle n' | c_i^\dagger | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n, n'} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_{n'})(t-t')} \langle n | c_i | n' \rangle \langle n' | c_i^\dagger | n \rangle. \end{aligned}$$

Este valor de expectación se puede llamar $G_i^>(t - t') = -i \langle c_i(t) c_i^\dagger(t') \rangle$. En el dominio de frecuencia,

$$G_i^>(\omega) = \int dt G_i^>(t) e^{i\omega t} = \frac{(-i)}{Z} \sum_{n, n'} e^{-\beta E_n} \delta(\omega + E_n - E_{n'}) \langle n | c_i | n' \rangle \langle n' | c_i^\dagger | n \rangle.$$

Análogamente,

$$G_i^<(t - t') = i \langle c_i^\dagger(t') c_i(t) \rangle = \frac{i}{Z} \sum_{n, n'} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_{n'})(t'-t)} \langle n | c_i^\dagger | n' \rangle \langle n' | c_i | n \rangle,$$

y

$$G_i^<(\omega) = \frac{i}{Z} \sum_{n, n'} e^{-\beta E_n} \delta(\omega - (E_n - E_{n'})) \langle n | c_i^\dagger | n' \rangle \langle n' | c_i | n \rangle.$$

Se puede demostrar que $G_i^<(\omega) = -G_i^>(\omega) e^{-\beta\omega}$.

La función de Green completa es

$$\begin{aligned} G_i^r(t, t') &= \theta(t - t') [G_i^>(t - t') - G_i^<(t' - t)] \\ &= \frac{-i}{Z} \sum_{n, n'} e^{-\beta E_n} \theta(t - t') \left[e^{i(E_n - E_{n'})(t-t')} \langle n | c_i | n' \rangle \langle n' | c_i^\dagger | n \rangle \right. \\ &\quad \left. + e^{i(E_n - E_{n'})(t'-t)} \langle n | c_i^\dagger | n' \rangle \langle n' | c_i | n \rangle \right]. \end{aligned}$$

Tomando la transformada de Fourier con el infinitesimal $\eta \rightarrow 0^+$,

$$\begin{aligned} G_i^r(\omega) &= \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} G_i(t) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta E_n} \left[\frac{\langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle}{\omega + i\eta + E_n - E_{n'}} + \frac{\langle n|c_i^\dagger|n'\rangle \langle n'|c_i|n\rangle}{\omega + i\eta - E_n + E_{n'}} \right]. \end{aligned}$$

Cambiando $n \rightarrow n'$ en el último término, la representación Lehmann para la función de Green retardada es

$$G_i^r(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} \left[\frac{\langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle}{\omega + i\eta + E_n - E_{n'}} \right] (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}). \quad (\text{A.23})$$

Por otro lado, la función de Green de Matsubara para $\tau > 0$,

$$\begin{aligned} G_i(\tau > 0) &= -\frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} e^{(\tau-\tau')E_n} \langle n|c_i e^{-(\tau-\tau')H} c_i^\dagger|n\rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta E_n} e^{(\tau-\tau')(E_n-E_{n'})} \langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle, \end{aligned}$$

y la transformada de Fourier

$$\begin{aligned} G_i(i\omega_n) &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} e^{\tau(E_n-E_{n'})} \langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta E_n} (e^{i\omega_n \beta} e^{(E_n-E_{n'})\beta} - 1) \frac{\langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle}{i\omega_n + E_n - E_{n'}}, \end{aligned}$$

pero $(e^{i\omega_n \beta} e^{(E_n-E_{n'})\beta} - 1) = (-e^{(E_n-E_{n'})\beta} - 1)$, luego

$$G_i(i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} (e^{-\beta E_{n'}} + e^{-\beta E_n}) \frac{\langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle}{i\omega_n + E_n - E_{n'}}. \quad (\text{A.24})$$

Se puede observar a partir de la Ec. (A.23) y la Ec. (A.24) que la función de Green retardada puede obtenerse a partir de la función de Green de Matsubara haciendo

$$G_i^r(\omega) = G_i(i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta), \quad (\text{A.25})$$

y la avanzada, $G_i^a(\omega) = G_i(i\omega_n \rightarrow \omega - i\eta)$. Estos reemplazos son válidos cuando la función de Green se expresa en una forma racional, cuidando la analiticidad en los planos complejos superiores (o inferiores).

Hay una representación muy útil llamada **representación espectral** basada en el hecho de que introduciendo la función espectral

$$\rho_i(x) = \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} (e^{-\beta E_{n'}} + e^{-\beta E_n}) \langle n|c_i|n'\rangle \langle n'|c_i^\dagger|n\rangle \delta(x + E_n - E_{n'}) \quad (\text{A.26})$$

la función de Green se puede obtener como

$$G_i(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\rho_i(x)}{i\omega - x}. \quad (\text{A.27})$$

Este es un caso particular de una transformada de Hilbert,

$$\mathcal{G}_i(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\rho_i(x)}{z - x}, \quad (\text{A.28})$$

donde $z \in \mathbb{C}$. La función de Matsubara se puede recuperar haciendo $G_i = \mathcal{G}_i(i\omega_n)$ y la retardada $G_i^r = \mathcal{G}_i(\omega + i\eta)$.

Teoría de perturbaciones a temperatura finita

Los auto-estados del Hamiltoniano completo K pueden ser muy difíciles de obtener. El operador K se puede separar en $K_0 + K_1$ y K_1 puede ser tratado como una perturbación. En la representación de Heisenberg y de interacción (denotada con sombrero) los operadores son

$$\begin{aligned} c_i(\tau) &= e^{K\tau} c_i e^{-K\tau}, \\ \hat{c}_i(\tau) &= e^{K_0\tau} c_i e^{-K_0\tau}. \end{aligned}$$

El operador matriz S está dado por

$$\hat{U}(\tau, \tau') = e^{\tau K_0} e^{-(\tau - \tau')K} e^{-\tau' K_0},$$

y satisface la ecuación diferencial $\partial_\tau \hat{U}(\tau, \tau') = -\hat{K}_1(\tau) \hat{U}(\tau, \tau')$ con la condición inicial $\hat{U}(\tau, \tau) = 1$. De esta manera, el producto que aparece en la función de Green resulta

$$\begin{aligned} c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') &= e^{K\tau} c_i e^{-K(\tau - \tau')} c_j^\dagger e^{-K\tau'} \\ &= e^{K\tau} e^{-K_0\tau} \hat{c}_i(\tau) e^{K_0\tau} e^{-K(\tau - \tau')} e^{-K_0\tau'} \hat{c}_j^\dagger(\tau') e^{K_0\tau'} e^{-K\tau'} \\ \Rightarrow c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') &= \hat{U}(0, \tau) \hat{c}_i(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{c}_j^\dagger(\tau') \hat{U}(\tau', 0). \end{aligned}$$

El factor de Boltzmann también se puede expresar en términos de la matriz S ,

$$\hat{U}(\beta, 0) = e^{\beta K_0} e^{-\beta K} \Rightarrow e^{-\beta K} = e^{-\beta K_0} \hat{U}(\beta, 0),$$

así la función de Matsubara partiendo de la Ec. (A.18) se puede reescribir como

$$G_{i,j}(\tau, \tau') = -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^\dagger(\tau') \right]$$

donde T_τ asegura que los operadores actúen en el orden apropiado y $Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} \hat{U}(\beta, 0) \right]$ es la gran función de partición.

Introduciendo la gran función de partición no-perturbada $Z_0 = \text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} \right]$,

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^\dagger(\tau') \right] &= Z_0 \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta K_0} T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^\dagger(\tau') \right]}{Z_0} \\ &= Z_0 \langle T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^\dagger(\tau') \rangle_0, \end{aligned}$$

y $Z = Z_0 \langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0$. Después de esta transformación en la representación de interacción, la ventaja es que ahora $\langle \rangle_0$ significa que el valor de expectación tiene que ser realizado con el Hamiltoniano no perturbado K_0 ; en particular, la traza se puede tomar en la base de estados propios de K_0 .

El truco de introducir un tiempo imaginario permite derivar una expresión muy compacta para la función de Matsubara

$$G_{i,j}(\tau, \tau') = - \frac{\langle T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{c}_i(\tau) \hat{c}_j^\dagger(\tau') \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}. \quad (\text{A.29})$$

La solución formal para el operador matriz S a temperatura finita es

$$\begin{aligned} U(\tau, \tau') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \dots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n T_\tau \left(\hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \right) \\ &= T_\tau \exp \left(- \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

que se puede utilizar para calcular la función de Green a un orden arbitrario.

He optado por presentar los siguientes dos ejemplos para ilustrar el cálculo de las funciones de Green a temperatura finita. Los cálculos corresponden al problema del nivel resonante discutido en la Sec. A.3. Estos resultados son muy útiles y son necesarios en el **Apéndice B** para la derivación de las expresiones analíticas de la aproximación *non-crossing*.

Ejemplo: La función de Green temperatura finita para los electrones localizados y de conducción

El Hamiltoniano que describe el nivel localizado es $E_d d_\sigma^\dagger d_\sigma$, que es diagonal. Los auto-estados son $|\sigma\rangle$ con eigenenergías E_d . A partir de la definición,

$$G_\sigma^0(\tau, \tau') = - \left[\theta(\tau - \tau') \langle \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \rangle_0 - \theta(\tau' - \tau) \langle \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \hat{d}_\sigma(\tau) \rangle_0 \right],$$

donde el signo menos es una consecuencia del carácter fermiónico de los operadores. Escribiendo explícitamente los operadores en la representación de interacción

$$\begin{aligned} G_\sigma^0(\tau, \tau') &= -\theta(\tau - \tau') \langle e^{H_0\tau} d_\sigma e^{-H_0(\tau-\tau')} d_\sigma^\dagger e^{-H_0\tau'} \rangle_0 \\ &\quad + \theta(\tau' - \tau) \langle e^{H_0\tau'} d_\sigma^\dagger e^{-H_0(\tau'-\tau)} d_\sigma e^{H_0\tau} \rangle_0, \end{aligned}$$

y utilizando el hecho de que

$$e^{H_0\tau} d_\sigma^\dagger e^{-H_0\tau} = e^{E_d\tau} d_\sigma^\dagger, \quad e^{H_0\tau} d_\sigma e^{-H_0\tau} = e^{-E_d\tau} d_\sigma,$$

la expresión se reduce a

$$\begin{aligned} G_\sigma^0(\tau, \tau') &= - \left[\theta(\tau - \tau') e^{-E_d(\tau-\tau')} \langle d_\sigma d_\sigma^\dagger \rangle_0 - \theta(\tau' - \tau) e^{E_d(\tau'-\tau)} \langle d_\sigma^\dagger d_\sigma \rangle_0 \right] \\ &= - \left[\theta(\tau - \tau') e^{-E_d(\tau-\tau')} (1 - f(E_d)) - \theta(\tau' - \tau) e^{E_d(\tau'-\tau)} f(E_d) \right], \end{aligned}$$

donde $f(E) = [e^{\beta(E-E_F)} + 1]^{-1}$ es la función de distribución de Fermi. Este es el resultado de la función de Green de temperatura finita no perturbada. Se puede observar que la función de Green depende sólo de $\tau - \tau'$, tal como indica una de sus propiedades. Realizando una transformada de Fourier

$$\begin{aligned} G_\sigma^0(i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} G_\sigma^0(\tau) \\ &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} [\theta(\tau)e^{-E_d\tau}(1-f(E_d)) - \theta(-\tau)e^{-E_d\tau}f(E_d)] \\ &= -(1-f(E_d)) \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n-E_d)\tau} = -(1-f(E_d)) \frac{e^{(i\omega_n-E_d)\beta} - 1}{i\omega_n - E_d}, \end{aligned}$$

pero $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, por lo que $e^{(i\omega_n-E_d)\beta} - 1 = e^{i(2n+1)\pi-E_d\beta} - 1 = -e^{-E_d\beta} - 1 = -(1-f(E_d))^{-1}$. Finalmente,

$$G_\sigma^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_d}, \quad (\text{A.31})$$

La parte del Hamiltoniano que describe los electrones de conducción es $\sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$, que también está en una forma diagonal. El estado fundamental es $|FS\rangle = \prod_{k < k_F} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger |\text{vac}\rangle$. Las energías pueden ser medidas desde el nivel de Fermi $\xi_k = \epsilon_k - \epsilon_F$.

A partir de la definición de la función de Green de temperatura finita

$$G_{k\sigma}^0(\tau, \tau') = - \left[\theta(\tau - \tau') \langle \hat{c}_{k\sigma}(\tau) \hat{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau') \rangle_0 - \theta(\tau' - \tau) \langle \hat{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau') \hat{c}_{k\sigma}(\tau) \rangle_0 \right],$$

donde escribiendo explícitamente los operadores en la representación de interacción

$$\begin{aligned} G_\sigma^0(\tau, \tau') &= -\theta(\tau - \tau') \langle e^{H_0\tau} c_{k\sigma} e^{-H_0(\tau-\tau')} c_{k\sigma}^\dagger e^{-H_0\tau'} \rangle_0 \\ &\quad + \theta(\tau' - \tau) \langle e^{H_0\tau'} c_{k\sigma}^\dagger e^{-H_0(\tau'-\tau)} c_{k\sigma} e^{H_0\tau} \rangle_0. \end{aligned}$$

Usando la propiedad

$$e^{H_0\tau} c_{k\sigma}^\dagger e^{-H_0\tau} = e^{\xi_k\tau} c_{k\sigma}^\dagger, \quad e^{H_0\tau} c_{k\sigma} e^{-H_0\tau} = e^{-\xi_k\tau} c_{k\sigma},$$

la expresión se reduce a

$$\begin{aligned} G_{k\sigma}^0(\tau, \tau') &= - \left[\theta(\tau - \tau') e^{-\xi_k(\tau-\tau')} \langle c_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger \rangle_0 - \theta(\tau' - \tau) e^{\xi_k(\tau'-\tau)} \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle_0 \right] \\ &= - \left[\theta(\tau - \tau') e^{-\xi_k(\tau-\tau')} (1 - f(\xi_k)) - \theta(\tau' - \tau) e^{\xi_k(\tau'-\tau)} f(\xi_k) \right]. \end{aligned}$$

Este es el resultado de la función de Green temperatura finita no perturbada para los electrones de conducción. Realizando una transformada de Fourier

$$G_{k\sigma}^0(i\omega_n) = - \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n - \xi_k)\tau} (1 - f(\xi_k)) = -(1 - f(\xi_k)) \frac{e^{(i\omega_n - \xi_k)\beta} - 1}{i\omega_n - \xi_k},$$

pero $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ y como antes

$$G_{k\sigma}^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k}. \quad (\text{A.32})$$

Las funciones de Green de Matsubara son muy útiles. La expansión perturbativa que conduce a los diagramas de Feynman se puede realizar como en el caso de $T = 0$. Hay varios detalles y puntos interesantes acerca de la construcción de diagramas en el tiempo imaginario, la transformación al dominio de frecuencia imaginaria y también la relación entre funciones de Green de Matsubara y las retardadas y avanzadas. He preferido hablar de estos puntos en un ejemplo concreto: el desarrollo diagramático que conduce a la **aproximación non-crossing** (NCA).

A.5. Ejemplo: la NCA

El problema de la impureza

La aproximación *non-crossing* (NCA) es una solución diagramática no perturbativa al problema impureza [Hewson, 1997]. En este problema, hay una impureza magnética con orbitales muy localizados que está dentro de un metal. La impureza se hibrida con los electrones de conducción del metal, que ocupan los niveles localizados. Los orbitales están muy localizados produciendo una gran repulsión de Coulomb. La doble ocupación de un orbital no es conveniente y la impureza permanece magnética a altas temperaturas. A temperaturas muy bajas hay un apantallamiento del magnetismo debido a la formación de un estado de muchos cuerpos que entrelaza electrones localizados y de conducción. Esto se conoce como el efecto Kondo [Kondo, 1964].

El Hamiltoniano propuesto por Anderson (modelo de la impureza de Anderson) [Anderson, 1961] para tratar el problema de una impureza magnética (con orbitales muy localizados d o f) rodeada por los electrones en un metal es

$$\begin{aligned} H_{AIM} = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} \\ & + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + h.c. \right), \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

que es como el modelo del nivel resonante con repulsión de Coulomb U . El primer término del Hamiltoniano describe a los electrones en el metal, $c_{k\sigma}^\dagger$ ($c_{k\sigma}$) crea (destruye) un electrón de conducción con impulso k y espín σ . En el segundo término, d_{σ}^\dagger (d_{σ}) es el operador de creación (destrucción) de los electrones con espín σ en el nivel localizado de energía E_d . Hay un costo de energía U para poner dos electrones en la impureza debido a la repulsión de Coulomb. El tercer término es la hibridación $V_{k\sigma}$. Este describe los procesos en los que los electrones del metal ocupan el nivel de la impureza o lo contrario.

La representación en partículas auxiliares

Con el fin de encontrar una solución a este modelo es posible utilizar la **aproximación non-crossing**. Dentro de esta aproximación, la hibridación V es tratada como una perturbación. El Hamiltoniano no perturbado no está en una forma diagonal. Esta dificultad se puede eludir con la introducción de partículas auxiliares como sugiere Coleman [Coleman, 1984]. Para el Hamiltoniano de la impureza

$$H_i = \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow},$$

los posibles ocupaciones se ilustran en la Fig. A.15. En el límite de muy fuerte repulsión de Coulomb ($U \rightarrow \infty$), es suficiente considerar la base de estados $\{|0\rangle, |\sigma\rangle\}$.

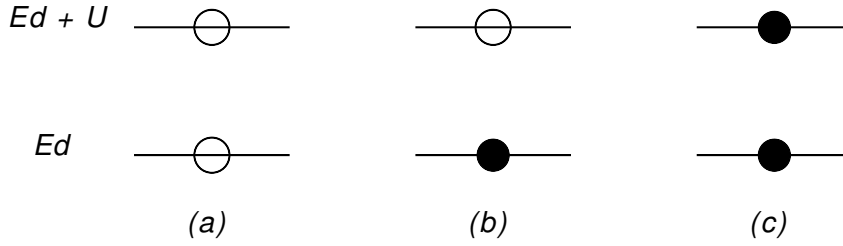


Figura A.15: Ocupaciones relevantes de la impureza: (a) vacía (b) un electrón con espín hacia arriba o hacia abajo y (c) dos electrones.

En este caso, H_i puede tomarse sólo como $\sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$ manteniendo la restricción

$$|0\rangle\langle 0| + \sum_{\sigma} |\sigma\rangle\langle \sigma| = 1.$$

El estado vacío se puede asociar a un bosón b y la impureza ocupada con un fermión f_{σ} . La identificación es

$$\begin{cases} |0\rangle \rightarrow b^{\dagger}|vac\rangle \\ |\sigma\rangle \rightarrow f_{\sigma}^{\dagger}|vac\rangle, \end{cases}$$

donde los operadores f_{σ}^{\dagger} y b^{\dagger} crean las partículas auxiliares y $|vac\rangle$ es un nuevo vacío. Con esta identificación, $d_{\sigma}^{\dagger} = |\sigma\rangle\langle 0| = f_{\sigma}^{\dagger}b$ y

$$Q = b^{\dagger}b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger}f_{\sigma} = 1, \quad (\text{A.34})$$

que es la restricción que asegura la repulsión de Coulomb infinita. Se puede demostrar que dado que $\{d_{\sigma}, d_{\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{\sigma,\sigma'}$, los operadores de partículas auxiliares satisfacen $\{f_{\sigma}, f_{\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{\sigma,\sigma'}$ y $[b, b^{\dagger}] = 1$.

El Hamiltoniano de la Ec. (A.33) puede reescribirse en términos de las partículas auxiliares

$$\tilde{H}_{AIM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_d f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} b^{\dagger} f_{\sigma} + H.c. \right),$$

donde el término hibridación tiene ahora tres operadores: dos para las partículas auxiliares y uno para un electrón de conducción. La restricción puede ser tenida en cuenta usando un multiplicador de Lagrange $K = \tilde{H}_{AIM} + \lambda Q$,

$$K = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} (E_d + \lambda) f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \lambda b^\dagger b + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger b^\dagger f_{\sigma} + h.c. \right). \quad (\text{A.35})$$

Este Hamiltoniano se puede separar como $K = K_0 + K_1$, con

$$\begin{aligned} K_0 &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} (E_d + \lambda) f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \lambda b^\dagger b, \\ K_1 &= \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger b^\dagger f_{\sigma} + h.c. \right), \end{aligned}$$

donde K_1 es tratado como una perturbación.

Las funciones de Green para las partículas auxiliares

De la definición de la Ec. (A.18), la función de Green a temperatura finita para el pseudo-fermión es

$$G_{\sigma}(\tau) = -\langle T_{\tau} f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle.$$

Al igual que en la Ec. (A.29), esta función de Green se puede calcular en la representación de interacción, utilizando el valor de expectación en los estados no perturbados del Hamiltoniano K_0 ,

$$G_{\sigma}(\tau) = -\frac{\langle T_{\tau} \hat{U}(\beta, 0) \hat{f}_{\sigma}(\tau) \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}. \quad (\text{A.36})$$

De la Ec. (A.30), la solución formal para el operador matriz S es

$$\begin{aligned} U(\tau) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\tau} d\tau_1 \dots \int_0^{\tau} d\tau_n T_{\tau} \left(\hat{K}_1(\tau_1) \dots \hat{K}_1(\tau_n) \right) \\ &= T_{\tau} \exp \left(- \int_0^{\tau} d\tau_1 \hat{K}_1(\tau_1) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Cuando este operador se considera a orden cero, el resultado es la función de Green desnuda para el pseudo-fermión

$$G_{\sigma}^0(\tau) = -\langle T_{\tau} \hat{f}_{\sigma}(\tau) \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle_0, \quad (\text{A.38})$$

Análogamente, la definición de la función de Green del bosón esclavo es

$$G_b(\tau) = -\langle T_{\tau} b(\tau) b^{\dagger}(0) \rangle = -\frac{\langle T_{\tau} \hat{U}(\beta, 0) \hat{b}(\tau) \hat{b}^{\dagger}(0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}, \quad (\text{A.39})$$

y el propagador desnudo para el bosón es

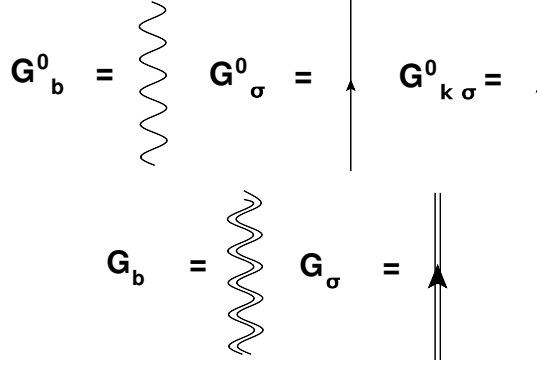
$$G_b^0(\tau) = -\langle T_{\tau} \hat{b}(\tau) \hat{b}^{\dagger}(0) \rangle_0, \quad (\text{A.40})$$

Dentro de la NCA se puede mostrar que el electrón de conducción no resulta vestido por las interacciones, por lo tanto

$$G_{k\sigma}^0(\tau) = -\langle T_\tau \hat{c}_{k\sigma}(\tau) \hat{c}_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle_0, \quad (\text{A.41})$$

Las funciones de Green vestidas y desnudas se representan diagramáticamente como se muestra en la Fig. A.16.

Figura A.16: Representación diagramática de las funciones de Green para las partículas auxiliares y el electrón de conducción. La función de Green desnuda para el bosón esclavo (pseudo-fermión) se representa con una línea ondulada (continua) y sin (con) una flecha. Las funciones de Green vestidas tienen una doble línea. Las funciones de Green para los electrones de conducción se representan con una flecha de línea discontinua.



Estas funciones de Green son los componentes básicos de la serie diagramática. El otro ingrediente clave son **los vértices de la teoría**. Están representados en la Fig. A.17. Hay dos posibles procesos descritos por K_1 : (i) un electrón que salta de la impureza a la banda de conducción (representado por $V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger b^\dagger f_\sigma$). En este proceso se destruye un pseudo-fermión mientras que un bosón y un electrón de conducción son creados. (ii) Un electrón de conducción que ocupa la impureza vacía (representado por $V_{k\sigma}^* f_\sigma^\dagger b c_{k\sigma}$). Este es un proceso en el que se destruye al electrón de conducción y también al bosón vacío mientras se crea un pseudo-fermión.

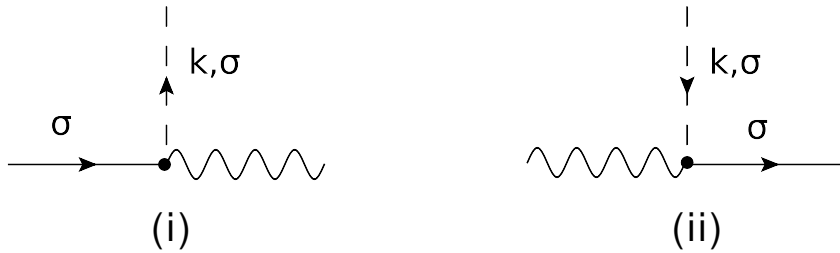


Figura A.17: Vértices de la perturbación K_1 descritos en el texto.

Expansión diagramática

Las funciones de Green se pueden calcular realizando una expansión diagramática. En el caso del pseudo-fermión, comenzando con el numerador de la Ec. (A.36)

$$\text{NUM}(\tau) = \langle T_\tau \hat{U}(\beta, 0) \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \rangle_0,$$

los sucesivos órdenes perturbativos están dados por el operador matriz S (véase la Ec. (A.37)). A orden cero, $NUM^{(0)}(\tau) = G_\sigma^0(\tau)$, es decir, el propagador desnudo. El próximo orden no trivial es $n = 2$,

$$\begin{aligned} NUM^{(2)}(\tau) &\sim \langle T_\tau \hat{K}_1(\tau_1) \hat{K}_1(\tau_2) \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \rangle_0 \\ &\sim \left\langle T_\tau \left[\hat{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau_1) \hat{b}^\dagger(\tau_1) \hat{f}_\sigma(\tau_1) + \hat{f}_\sigma^\dagger(\tau_1) \hat{b}(\tau_1) \hat{c}_{k\sigma}(\tau_1) \right] \right. \\ &\quad \times \left. \left[\hat{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau_2) \hat{b}^\dagger(\tau_2) \hat{f}_\sigma(\tau_2) + \hat{f}_\sigma^\dagger(\tau_2) \hat{b}(\tau_2) \hat{c}_{k\sigma}(\tau_2) \right] \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \right\rangle_0, \end{aligned}$$

donde manteniendo los términos con el mismo número de operadores de creación y destrucción de cada tipo y recordando que el intercambio de las variables internas da sólo un factor de $2! = 2$,

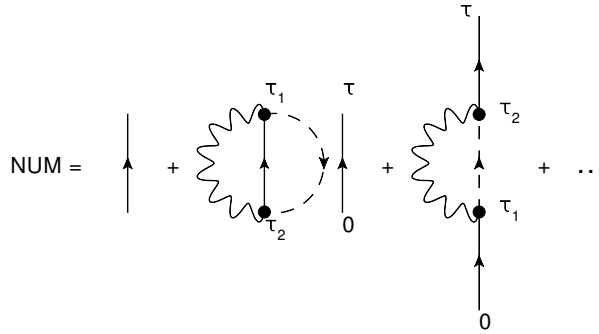
$$NUM^{(2)}(\tau) \sim \left\langle T_\tau \hat{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau_1) \hat{b}^\dagger(\tau_1) \hat{f}_\sigma(\tau_1) \hat{f}_\sigma^\dagger(\tau_2) \hat{b}(\tau_2) \hat{c}_{k\sigma}(\tau_2) \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \right\rangle_0.$$

Aquí τ_1 y τ_2 son tiempos imaginarios intermedios entre 0 y τ . Este valor de expectación se puede calcular con la ayuda del teorema de Wick. Formando todas las posibles contracciones ordenadas temporalmente

$$\begin{aligned} &\sim \langle T_\tau \hat{c}_{k\sigma}(\tau_2) \hat{c}_{k\sigma}^\dagger(\tau_1) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{b}(\tau_2) \hat{b}^\dagger(\tau_1) \rangle_0 \times \\ &\quad \left[\langle T_\tau \hat{f}_\sigma(\tau_1) \hat{f}_\sigma^\dagger(\tau_2) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \rangle_0 + \langle T_\tau \hat{f}_\sigma(\tau_1) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(\tau_2) \rangle_0 \right]. \end{aligned}$$

Estas dos contribuciones están representadas en la Fig. A.18 en el desarrollo hasta segunda orden.

Figura A.18: Desarrollo diagramático del numerador de la Ec. (A.36) hasta segunda orden.



Las contracciones con el factor $\langle \hat{f}_\sigma(\tau) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \rangle_0$ están asociadas con diagramas desconectados. Estos diagramas pueden ser factorizados y anulan el denominador de la Ec. (A.36) como se ilustra en la Fig. A.19. El denominador tiene sólo **diagramas de vacío**.

Dado que el factor que viene de las variables de integración internas cancela el $n!$ en la expresión para el operador de evolución y dado que los diagramas desconectados cancelan el denominador de la Ec. (A.36), la serie diagramática para la función de Green se puede conseguir teniendo en cuenta sólo los diagramas conectados y topológicamente diferentes que se pueden construir compatibles con los vértices. Siguiendo la idea de Feynman, todo los procesos intermedios partiendo de la creación en 0 hasta la medición en τ deben ser considerados.

El procedimiento para construir los diagramas dentro de la NCA se ilustra en la Fig. A.20. El procedimiento es el siguiente:

Figura A.19: Desarrollo diagramático del numerador y el denominador de la Ec. (A.36) hasta segunda orden.

$$\frac{\text{NUM}}{\text{DENOM}} = \frac{\begin{array}{c} \uparrow \\ + \text{diagrama con } \tau_1, \tau_2 \text{ y } \tau \\ + \text{diagrama con } \tau_2, \tau_1 \text{ y } \tau \\ + \dots \end{array}}{1 + \text{diagrama con } \tau_1, \tau_2 \text{ y } \tau + \dots}$$

- Dado un número de vértices, dibujar en línea todos los propagadores de partículas auxiliares.
- Dibujar los propagadores de electrones de conducción hacia un lado.
- Para cada número de vértices, construir todos los diagramas topológicamente diferentes compatibles con la forma de los vértices.

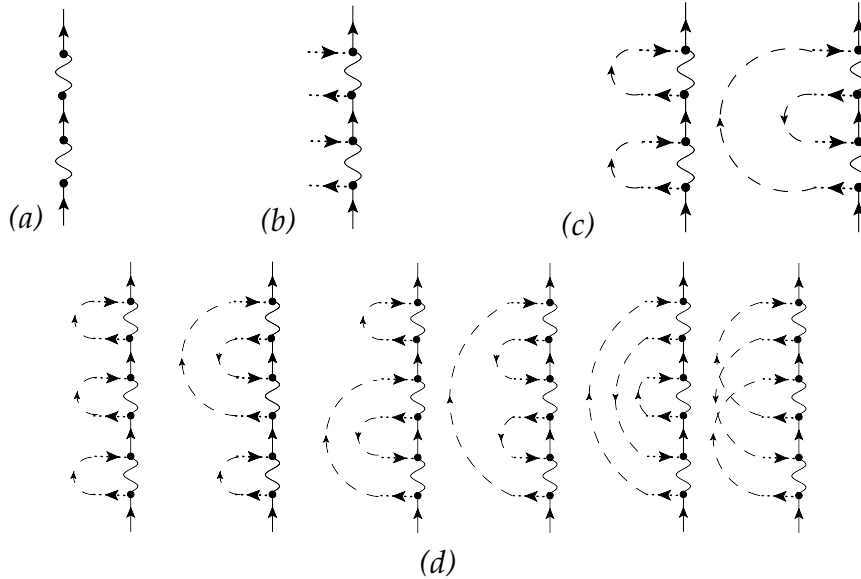


Figura A.20: (a)-(c) Procedimiento en NCA para la construcción de los diagramas de la serie. (d) Los diagramas obtenidos en el orden $n = 6$.

Como ejemplo, los diagramas obtenidos por $n = 6$ se muestran en la Fig. A.20(d). Se puede observar que en el último diagrama hay un **cruce** de propagadores de electrones de conducción. Dentro de la aproximación *non-crossing* estos diagramas no se tienen en cuenta. Esto es muy importante porque **sin diagramas con cruces** es posible llevar adelante una resumación que permite obtener un conjunto de ecuaciones de Dyson. La expansión

diagramática para las funciones de Green del pseudo-fermión y el bosón manteniendo sólo los diagramas sin cruces se muestra en la Fig. A.21.

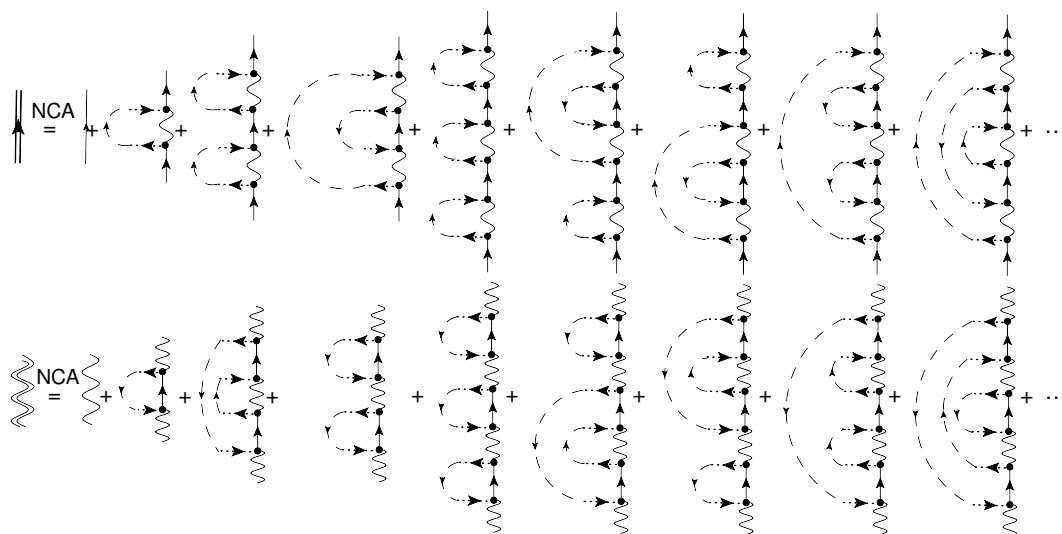


Figura A.21: Desarrollo diagramático de las funciones de Green del pseudo-fermión y el bosón manteniendo sólo los diagramas sin cruces.

La ventaja de descartar los diagramas con cruces se hará evidente en un momento. Se puede observar en la Fig. A.21 que hay dos tipos de diagramas. Hay diagramas donde aparece una estructura repetida que pueden ser separados sin cortar un propagador a la mitad. Estos se llaman **reducibles**. Por el contrario, los diagramas de que no pueden ser divididos sin cortar un propagador se llaman **irreducibles**. La expansión diagramática de la función de Green del pseudo-fermión en términos de diagramas irreducibles se muestra en la Fig. A.22(a).

Como se muestra en la Fig. A.22(b), tomando un factor común adecuado es posible reconocer el desarrollo de la función de Green del bosón vestido (véase la Fig. A.21). Esto se llama **resumación**. Dentro de la NCA, es decir, sin tener en cuenta los diagramas con cruces, es posible resumar todos los diagramas irreducibles en una sola expresión compacta. Los diagramas correspondientes se muestran en la Fig. A.22(c). La “burbuja” formada por el propagador de los electrones de conducción y el propagador del bosón vestido es la **auto-energía irreducible** de la NCA.

La ventaja de separar los diagramas en reducibles e irreducible es que ahora todas las burbujas pueden ser reemplazadas por auto-energías irreducibles. Estas burbujas incluyen todos los órdenes en perturbaciones. Esta expansión se muestra en la Fig. A.23(a). La estructura del desarrollo es ahora similar al caso del nivel resonante (véase la Fig. A.12). Como se muestra en la Fig. A.23(b) tomando un factor común adecuado, se puede recuperar al propagador del pseudo-fermión vestido. La función de Green para el pseudo-fermión se puede calcular con una expresión diagramática muy compacta: la ecuación de Dyson dentro de la NCA. El cálculo implica al propagador del bosón vestido en la auto-energía.

Figura A.22:

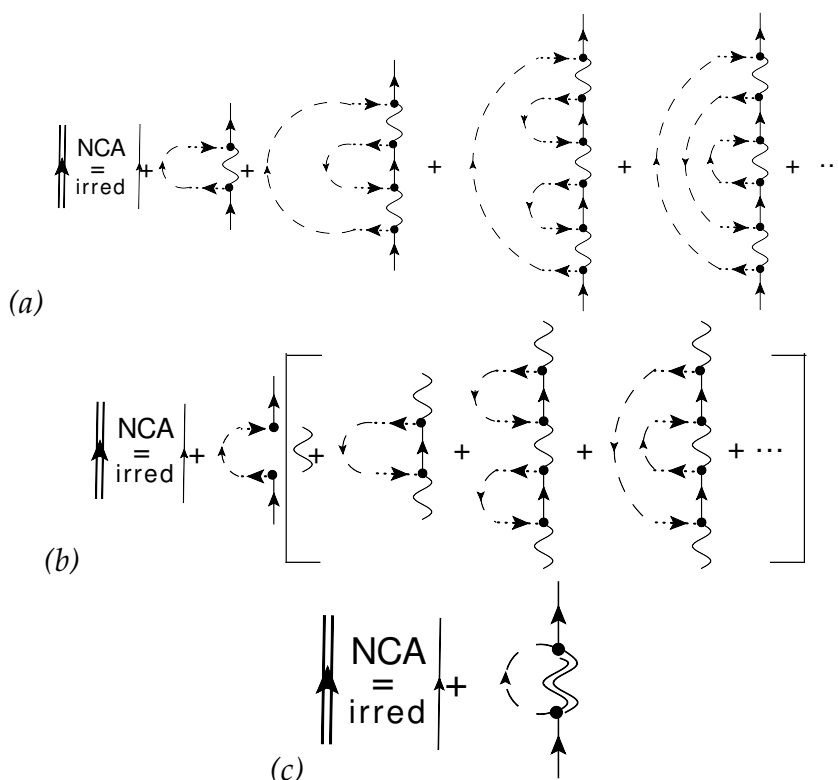
(a) Desarrollo

diagramático del pseudo-fermión

en términos de los diagramas irreducibles.

(b) Factorización de la serie.

(c) Forma compacta en términos de la función de Green vestida del bosón.

**Figura A.23:**

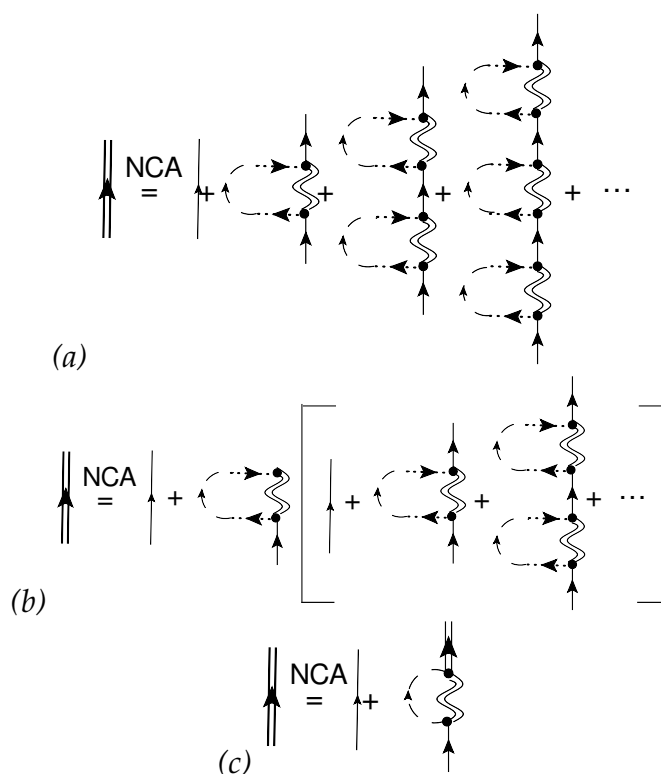
(a) Desarrollo diagramático del pseudo-fermión

reemplazando todas las burbujas

por auto-energías irreducibles. (b)

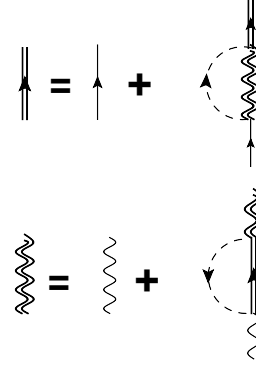
Factorización de la serie. (c) Ecuación

de Dyson en NCA.



Trabajando de forma análoga con el desarrollo diagramático para la función de Green del bosón se encuentra el resultado mostrado en la Fig. A.21. Se obtiene entonces un conjunto de ecuaciones de Dyson acopladas: el sistema auto-consistente NCA. Este se muestra en la Fig. A.24.

Figura A.24: Conjunto de ecuaciones de Dyson diagramáticas auto-consistentes dentro de la NCA.



Todos los detalles técnicos de la aproximación *non-crossing* se discuten en el **Apéndice B**.

A.6. Funciones de Green de no-equilibrio

La teoría de perturbaciones tiene que ser re-examinada fuera de equilibrio. Como se discutió en la Sec. A.1, una vez que el Hamiltoniano se separa como $H = H_0 + V$, uno de los puntos clave para calcular valores de expectación es la posibilidad de relacionar el estado fundamental exacto $|\hat{\psi}\rangle$ con el estado fundamental no perturbado $|\varphi_0\rangle$ por medio de una evolución adiabática con el operador matriz S

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = \hat{S}(t, -\infty)|\varphi_0(0)\rangle.$$

Esto está garantizado por teorema de Gell-man y Low. La idea es que las perturbaciones están apagadas en $t \rightarrow -\infty$ y el sistema está en el estado fundamental de H_0 . Durante la evolución en el tiempo, la perturbación se enciende adiabáticamente. Al tiempo t el sistema está en el estado fundamental de H .

En la otra dirección, si la evolución temporal se realiza desde el tiempo t a $t \rightarrow \infty$ y la perturbación es apagada adiabáticamente, es razonable suponer que el estado final, a menos de una fase, es una vez más el estado fundamental de H_0 , $|\varphi_0(0)\rangle$

$$\varphi_0(0)e^{iL} = \hat{S}(+\infty, t)\hat{\psi}(t).$$

Esto **no puede garantizarse fuera del equilibrio**. Durante el tiempo en que la perturbación se enciende el sistema evoluciona pasando por un régimen transitorio a un régimen estacionario en el momento t . La evolución no se puede rebobinar. No es posible invertir la dirección del tiempo y observar el transitorio “hacia atrás”. Es la principal característica de un problema de no equilibrio, existe una dirección para el tiempo. Este es un punto clave, ya que no hay información sobre el estado del sistema a tiempos muy grandes $t \rightarrow \infty$.

En el contexto de los problemas de transporte, el sistema se puede separar en tres partes: dos reservorios de electrones correspondientes a la fuente

y el sumidero (o izquierdo y derecho), que están acoplados a un conductor central. Las propiedades de transporte están determinadas principalmente por el conductor central. En este caso, un tratamiento posible del problema es dividir el Hamiltoniano como $H = H_C + H_{S/D} + V_{MIX}$, donde H_C describe al conductor central, $H_{S/D}$ la fuente y el sumidero y V_{MIX} describe el acoplamiento de las partes. Este último término se trata como una perturbación. Cuando se aplica un voltaje, los reservorios de fuente y sumidero tienen diferentes potenciales electro-químicos. Siguiendo la misma idea que en equilibrio, a $t \rightarrow -\infty$ la perturbación está apagada y, por lo tanto, los cables y el conductor central están desconectados. No hay corriente fluyendo y el sistema está en el estado fundamental $|\varphi_0(0)\rangle$. A medida que el sistema evoluciona en el tiempo la perturbación se enciende adiabáticamente. Este es un régimen transitorio. En el tiempo t el sistema alcanza un régimen estacionario y hay una corriente establecida entre la fuente y el sumidero a través del conductor central. Se puede considerar que el sistema está en el estado fundamental de H , $|\hat{\psi}(t)\rangle$. Para calcular los valores de expectación, es necesario decir algo sobre el estado para tiempos grandes, con $t \rightarrow \infty$. Fuera de equilibrio, este estado no se puede relacionar nuevamente con el estado fundamental no perturbado. La corriente no fluye hacia atrás para recuperar el estado inicial (es como un vaso de agua que cae sobre la mesa...).

Lo único que se puede saber con certeza es el estado en $t \rightarrow -\infty$. Sería necesario calcular algo así como

$$G_{i,j}(t, t') = -i \frac{\langle T \hat{S}(-\infty, -\infty) \hat{c}_i(t) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0}{\langle \hat{S}(-\infty, -\infty) \rangle_0},$$

pero no está claro en absoluto lo que esta expresión significa realmente. En particular, ¿cuál es el ordenamiento temporal correcto?

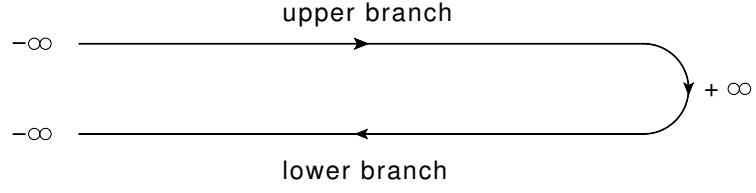
Hay una forma inteligente de eludir este problema propuesta por Keldysh [Keldysh, 1964]. El formalismo se llama el formalismo de Keldysh y la ventaja es que al final tiene más o menos la misma pinta que el caso de equilibrio. La desventaja es que hay más propagadores y más diagramas!

El contorno de Keldysh

Dado que el estado de referencia bien definido sólo está a $t \rightarrow -\infty$, la evolución se puede hacer hasta el tiempo t y luego continuada hasta $+\infty$ con un operador matriz $S \hat{S}_{C_1}(+\infty, -\infty)$ y luego de vuelta a $-\infty$ con $\hat{S}_{C_2}(-\infty, +\infty)$. El punto importante para no perder de vista el ordenamiento temporal es que estas evoluciones se realizan en un contorno en el tiempo llamado **contorno de Keldysh**. Este se ilustra en la Fig. A.25. Hay dos ramas, la rama superior C_1 , ordenada desde $-\infty \rightarrow \infty$ y la rama inferior C_2 ordenada desde $+\infty \rightarrow -\infty$.

Los puntos temporales en el contorno se llaman s . La orden temporal se da siguiendo el recorrido del contorno. Si s_1 está en la rama superior y s_2 en la rama inferior, s_1 es siempre previo a s_2 . La función de Green de no

Figura A.25:
El contorno de
Keldysh.

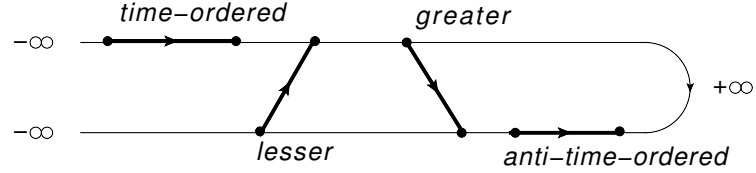


equilibrio se puede definir como

$$G_{i,j}(s, s') = -i\langle T_C c_i(s) c_j^\dagger(s') \rangle, \quad (\text{A.42})$$

donde T_C es el operador de orden temporal en el contorno. El significado de esto será más claro en un momento. De acuerdo a si s y s' están en la rama superior o inferior, hay cuatro posibles funciones de Green. Ellas se ilustran en la Fig. A.26.

Figura A.26: Las
posibles funciones
de Green de no
equilibrio.



- Si $s, s' \in C_1$, la función de Green se llama **ordenada temporal**

$$G_{i,j}^T(t - t') = -i\langle T c_i(t) c_j^\dagger(t') \rangle,$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal estándar.

- Si la destrucción se produce antes de la creación, es decir, si $s \in C_1$ y $s' \in C_2$, la función de Green se llama **menor**

$$G_{i,j}^<(t - t') = i\langle c_j^\dagger(t') c_i(t) \rangle, \quad (\text{A.43})$$

y no hay necesidad de ordenar el tiempo, $t' > t$. Hay un cambio de signo debido a la permutación de los operadores fermiónicos.

- Si la creación es antes de la destrucción, es decir $s \in C_2$ y $s' \in C_1$, la función de Green se llama **mayor**

$$G_{i,j}^>(t - t') = -i\langle c_i(t) c_j^\dagger(t') \rangle, \quad (\text{A.44})$$

y aquí $t > t'$ es implícito.

- Si $s, s' \in C_2$, la función de Green se llama **anti-ordenada temporal**

$$G_{i,j}^{\tilde{T}}(t - t') = -i\langle \tilde{T} c_i(t) c_j^\dagger(t') \rangle,$$

donde \tilde{T} ordena los operadores haciendo los tiempos mayores actuar primero.

Funciones de Green retardadas y avanzadas

Además de estos cuatro propagadores, la **función de Green retardada** se define como

$$G_{i,j}^r(t-t') = -i\theta(t-t')\langle\{c_i(t), c_j^\dagger(t')\}\rangle,$$

donde $\{, \}$ es el anti-conmutador. La función de Green **avanzada** se define como

$$G_{i,j}^a(t-t') = i\theta(t'-t)\langle\{c_i(t), c_j^\dagger(t')\}\rangle.$$

Las seis funciones de Green no son todas independientes. Hay relaciones entre ellas. A partir de la definición, es claro que

$$(G^> - G^<)(t-t') = (G^T - G^{\tilde{T}})(t-t'),$$

y también,

$$\begin{aligned} G^r(t-t') &= (G^T - G^<)(t-t'), \\ G^a(t-t') &= (G^T - G^>)(t-t'), \end{aligned}$$

por ende

$$\begin{aligned} G^r(t-t') &= -\theta(t-t')(G^< - G^>)(t-t'), \\ G^a(t-t') &= -\theta(t'-t)(G^> - G^<)(t-t'). \end{aligned}$$

Las funciones de Green retardadas y avanzadas están conectadas a las menores y mayores por la relación

$$(G^r - G^a)(t-t') = (G^> - G^<)(t-t'), \quad (\text{A.45})$$

que es muy útil. Se puede demostrar que sólo tres propagadores son independientes.

Teoría de perturbaciones de no-equilibrio

Una vez que el ordenamiento temporal está bien establecido en el contorno de Keldysh, el valor de expectación en el estado fundamental exacto puede ser relacionado con el estado fundamental no perturbado y, por tanto, de la Ec. (A.42)

$$G_{i,j}(s, s') = -i \frac{\langle T_C \hat{S}_C(-\infty, -\infty) \hat{c}_i(s) \hat{c}_j^\dagger(s') \rangle_0}{\langle \hat{S}_C(-\infty, -\infty) \rangle_0}, \quad (\text{A.46})$$

donde $\hat{S}_C(-\infty, -\infty)$ es el **operador matriz S en el contorno**

$$\hat{S}_C(-\infty, -\infty) = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \int ds_1 \int ds_2 \dots \int ds_n T_C \hat{V}(s_1) \dots \hat{V}(s_n), \quad (\text{A.47})$$

donde los tiempos internos s_1, \dots, s_n viven en el contorno de Keldysh. Es muy interesante observar que para cada uno de los posibles propagadores hay una contribución de los demás.

Como un ejemplo, la **función de Green menor** se puede desarrollar en serie

$$G_{i,j}^{<}(t-t') = i \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \int ds_1 \int ds_2 \dots \int ds_n \frac{\langle T_C \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{V}(s_1) \dots \hat{V}(s_n) \hat{c}_i(t) \rangle_0}{\langle \hat{S}_C(-\infty, -\infty) \rangle_0},$$

donde está implícito que t está en la rama superior (primero destruir) y t' en la rama inferior (luego crear), por lo que $t' > t$. Los tiempos internos viven en el contorno. En el orden cero,

$$g_{i,j}^{<}(t-t') \equiv G_{i,j}^{<(0)}(t-t') = i \langle \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{c}_i(t) \rangle_0,$$

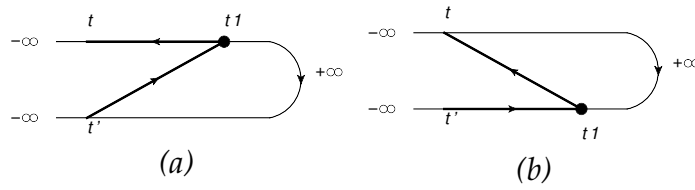
es la función de Green menor no perturbada, indicada con letra minúscula g .

A primer orden, analizando sólo el numerador

$$G_{i,j}^{<(1)}(t-t') \sim i(-i) \int ds_1 \langle T_C \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{V}(s_1) \hat{c}_i(t) \rangle_0,$$

e incluso sin una forma explícita de V , se puede notar que s_1 puede estar en la rama superior o inferior. Como se muestra en la Fig. A.27, para este único vértice, hay dos posibilidades.

Figura A.27: Los posibles diagramas en el desarrollo de las funciones de Green menores a primer orden en perturbaciones con un V arbitrario. El tiempo interno puede estar en la (a) rama superior o (b) inferior del contorno.



Con el fin de avanzar un poco más con el ejemplo, una expresión explícita para la perturbación puede ser considerada $V = V_{\lambda_1, \lambda_2} c_{\lambda_1}^\dagger c_{\lambda_2}$, por lo tanto

$$G_{i,j}^{<(1)}(t-t') \sim i(-i) V_{\lambda_1, \lambda_2} \int ds_1 \langle T_C \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(s_1) \hat{c}_{\lambda_2}(s_1) \hat{c}_i(t) \rangle_0.$$

Este valor de expectación se puede calcular usando el teorema de Wick, es decir, sumando todas las posibles contracciones de pares ordenados temporalmente en el contorno. Al igual que antes, todas las contracciones con un factor de $\langle \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{c}_i(t) \rangle_0$ conducen a diagramas desconectados que cancelan el

denominador. Manteniendo sólo los diagramas conectados, (a) si $s_1 \in C_1$, $s_1 \rightarrow t_1$, con $t_1 \in (-\infty, \infty)$,

$$G_{i,j}^{<(1a)}(t-t') \sim i(-i)V_{\lambda_1,\lambda_2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0,$$

donde las funciones de Green menor y ordenada temporal no perturbadas pueden ser reconocidas,

$$G_{i,j}^{<(1a)}(t-t') \sim V_{\lambda_1,\lambda_2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 g_{\lambda_2,j}^{<}(t_1-t') g_{i,\lambda_1}^T(t-t_1).$$

Como en equilibrio, la serie diagramática se puede construir usando los propagadores no perturbados como bloques de construcción.

(b) Si $s_1 \in C_2$, $s_1 \rightarrow t_1$, con $t_1 \in (+\infty, -\infty)$

$$G_{i,j}^{<(1b)}(t-t') \sim i(-i)V_{\lambda_1,\lambda_2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \tilde{T} \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \langle \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \hat{c}_i(t) \rangle_0,$$

donde las funciones de Green menor y anti-ordenada-temporal pueden ser reconocidas

$$G_{i,j}^{<(1b)}(t-t') \sim -V_{\lambda_1,\lambda_2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 g_{\lambda_2,j}^{\tilde{T}}(t_1-t') g_{i,\lambda_1}^{<}(t-t_1).$$

Aquí hay un cambio de signo al invertir los límites de integración.

El punto importante es que para cada vértice, hay dos posiciones posibles en el contorno que conducen en este caso a dos posibles diagramas. El primer orden para la función de Green menor da,

$$G_{i,j}^{<(1)}(t-t') = V_{\lambda_1,\lambda_2} \int dt_1 \left[g_{i,\lambda_1}^T(t-t_1) g_{\lambda_2,j}^{<}(t_1-t') - g_{i,\lambda_1}^{<}(t-t_1) g_{\lambda_2,j}^{\tilde{T}}(t_1-t') \right].$$

Es claro cómo continúa el procedimiento. A segundo orden,

$$G_{i,j}^{<(2)}(t-t') = i \frac{(-i)^2}{2!} \int ds_1 \int ds_2 \langle T_C \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{V}(s_1) \hat{V}(s_2) \hat{c}_i(t) \rangle_0, \text{ (connected)}$$

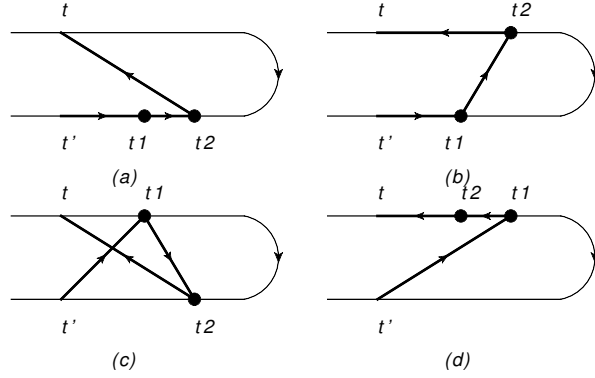
ahora hay dos tiempos internos en el contorno s_1 y s_2 . Cada uno puede estar o bien en la parte superior o en la rama inferior, dando lugar a 4 posibilidades de los vértices. El cambio de los tiempos internos conduce a diagramas equivalentes. Este factor cancela el $n!$ en el desarrollo en serie. La expansión diagramática de las funciones de Green puede hacerse considerando sólo los diagramas conectados y topológicamente diferentes

$$G_{i,j}^{<}(t-t') = i \sum_n (-i)^n \int ds_1 \cdots \int ds_n \langle T_C \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{V}(s_1) \cdots \hat{V}(s_n) \hat{c}_i(t) \rangle_0. \quad (\text{A.48})$$

El resultado en el segundo orden se muestra en la Fig. A.28.

En la Fig. A.28(a) s_1 y s_2 están ambos en la rama inferior. El diagrama está formado por dos funciones de Green anti-ordenadas y una menor. En

Figura A.28: Los posibles diagramas conectados en desarrollo de las funciones de Green menores a segundo orden en perturbaciones. Las cuatro posibilidades (a)-(d) para los tiempos a lo largo del contorno.



la Fig. A.28(b) s_1 está en la rama inferior y s_2 está en la rama superior. El diagrama está formado por una función de Green ordenada, una menor y una anti-ordenada. En la Fig. A.28(c) s_1 está en la rama superior y s_2 en la rama inferior. El diagrama está formado por dos funciones de Green menor y una mayor. Finalmente, en la Fig. A.28(d) ambos tiempos internos están en la rama superior y el diagrama está formado por dos funciones de Green ordenadas y una menor.

Es de destacar que todo los propagadores toman parte en el desarrollo. Las cuatro contribuciones se muestran en la Fig. A.28

$$\begin{aligned}
 G_{i,j}^{<(2a)}(t-t') &\sim \langle \tilde{T} \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \langle \tilde{T} \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0 \langle \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \hat{c}_i(t) \rangle_0, \\
 G_{i,j}^{<(2b)}(t-t') &\sim \langle \tilde{T} \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \hat{c}_j^\dagger(t') \rangle_0 \langle \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \rangle_0 \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0, \\
 G_{i,j}^{<(2c)}(t-t') &\sim \langle \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \rangle_0 \langle \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0 \langle \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \hat{c}_i(t) \rangle_0, \\
 G_{i,j}^{<(2d)}(t-t') &\sim \langle \hat{c}_j^\dagger(t') \hat{c}_{\lambda_2}(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_{\lambda_4}(t_2) \hat{c}_{\lambda_1}^\dagger(t_1) \rangle_0 \langle T \hat{c}_i(t) \hat{c}_{\lambda_3}^\dagger(t_2) \rangle_0.
 \end{aligned}$$

puede escribirse en términos de las funciones de Green no perturbadas

$$\begin{aligned}
 G_{i,j}^{<(2a)}(t-t') &\sim g_{\lambda_2,j}^{\tilde{T}}(t_1-t') g_{\lambda_4,\lambda_1}^{\tilde{T}}(t_2-t_1) g_{i,\lambda_3}^{<}(t-t_2), \\
 G_{i,j}^{<(2b)}(t-t') &\sim g_{\lambda_2,j}^{\tilde{T}}(t_1-t') g_{\lambda_4,\lambda_1}^{<}(t_2-t_1) g_{i,\lambda_3}^T(t-t_2), \\
 G_{i,j}^{<(2c)}(t-t') &\sim g_{\lambda_2,j}^{<}(t_1-t') g_{\lambda_4,\lambda_1}^{>}(t_2-t_1) g_{i,\lambda_3}^{<}(t-t_2), \\
 G_{i,j}^{<(2d)}(t-t') &\sim g_{\lambda_2,j}^{<}(t_1-t') g_{\lambda_4,\lambda_1}^T(t_2-t_1) g_{i,\lambda_3}^T(t-t_2).
 \end{aligned}$$

La ecuación de Dyson de no equilibrio

Hay una alternativa para llevar a cabo el desarrollo de una manera muy compacta y pictórica. Si la rama superior se llama + y la rama inferior se llama -, a continuación,

$$G^T \equiv G^{++}; G^{<} \equiv G^{-+}; G^{>} \equiv G^{+-}; G^{\tilde{T}} \equiv G^{--}.$$

A partir del ejemplo, es evidente que el cálculo de uno de estos propa-

gadores va como

$$\begin{aligned}
G^{-+} &= g^{-+} + V (g^{--}g^{-+} + g^{-+}g^{++}) \\
&+ V^2 (g^{--}g^{--}g^{-+} + g^{--}g^{-+}g^{++} + g^{-+}g^{+-}g^{-+} + g^{-+}g^{++}g^{++}) \\
&+ V^3 (g^{--}g^{--}g^{--}g^{-+} + g^{--}g^{--}g^{-+}g^{++} + g^{--}g^{-+}g^{+-}g^{-+} \\
&\quad + g^{--}g^{-+}g^{++}g^{++} + g^{-+}g^{+-}g^{--}g^{-+} + g^{-+}g^{+-}g^{-+}g^{++} \\
&\quad + g^{-+}g^{++}g^{+-}g^{-+} + g^{-+}g^{++}g^{++}g^{++}) + \dots
\end{aligned}$$

donde tomando un factor común g^{--} y g^{-+} ,

$$\begin{aligned}
G^{-+} &= g^{-+} + g^{--}V [g^{-+} + V (g^{--}g^{-+} + g^{-+}g^{++}) \\
&\quad + V^2 (g^{--}g^{--}g^{-+} + g^{--}g^{-+}g^{++} + g^{-+}g^{+-}g^{-+} + g^{-+}g^{++}g^{++})] \\
&\quad g^{-+}V [g^{++} + V (g^{+-}g^{-+} + g^{++}g^{++}) \\
&\quad + V^2 (g^{+-}g^{--}g^{-+} + g^{+-}g^{-+}g^{++} + g^{++}g^{+-}g^{-+} + g^{++}g^{++}g^{++})] + \dots
\end{aligned}$$

los propagadores vestidos pueden ser recuperados

$$G^{-+} = g^{-+} + g^{--}V G^{-+} + g^{-+}V G^{++}.$$

Este es la **ecuación de Dyson de no equilibrio**. En contraste con la situación de equilibrio, hay cuatro propagadores y la ecuación de Dyson es como una matriz. En un caso más general, la ecuación de Dyson para el desarrollo perturbativo se puede expresar como

$$\begin{aligned}
G^{-+} &= g^{-+} + g^{--}\Sigma^{--}G^{-+} + g^{--}\Sigma^{-+}G^{++} + g^{-+}\Sigma^{+-}G^{-+} + g^{-+}\Sigma^{++}G^{++} \\
&= g^{-+} + g^{--} [\Sigma^{--}G^{-+} + \Sigma^{-+}G^{++}] + g^{-+} [\Sigma^{+-}G^{-+} + \Sigma^{++}G^{++}],
\end{aligned}$$

donde Σ es la auto-energía. Introduciendo las matrices

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^{++} & \Sigma^{+-} \\ \Sigma^{-+} & \Sigma^{--} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} g^{++} & g^{+-} \\ g^{-+} & g^{--} \end{pmatrix},$$

la **ecuación de Dyson de no equilibrio** resulta

$$\mathbf{G} = \mathbf{g} + \mathbf{g}\mathbf{\Sigma}\mathbf{G}, \quad (\text{A.49})$$

y un elemento en particular, $G^{-+} = g^{-+} + (\mathbf{g}\mathbf{\Sigma}\mathbf{G})^{-+}$.

En el ejemplo la auto-energía es muy simple, es un solo una auto-energía de un cuerpo $\Sigma^{(one)}$ que tiene la forma matricial $\mathbf{\Sigma} = V\mathbf{I}$, donde \mathbf{I} es la matriz identidad 2×2 .

El teorema de Langreth

La ecuación de Dyson de no-equilibrio se puede expresar en el contorno Keldysh,

$$\begin{aligned}
G(s, s') &= g(s, s') + \int ds_1 g(s, s_1) \Sigma^{(one)}(s_1) G(s_1, s') \\
&+ \int ds_1 \int ds_2 g(s, s_1) \Sigma(s_1, s_2) G(s_2, s'). \quad (\text{A.50})
\end{aligned}$$

Hay un teorema muy útil de Langreth [Langreth, 1967] que permite tratar a estos productos de una manera simple. La demostración no se da aquí. El resultado puede ser tomado como una receta para traducir un diagrama del contorno a las variables en tiempo real. Para un producto matricial $D = ABC$, el teorema indica que

$$D^< = A^r B^r C^< + A^r B^< C^a + A^< B^a C^a, \quad (\text{A.51})$$

en términos de las funciones de Green retardadas y avanzadas. Esto tiene que ser entendido como

$$D^<(t, t') = \int dt_1 \int dt_2 A^r(t, t_1) B^r(t_1, t_2) C^<(t_2, t') + \text{etc..}$$

Además, a partir del teorema

$$D^r = A^r B^r C^r, \quad (\text{A.52})$$

que tiene que ser entendido como

$$D^r(t, t') = \int_{t'}^t dt_1 A^r(t, t_1) \int_{t_1}^t dt_2 B^r(t_1, t_2) C^r(t_2, t),$$

por lo tanto las funciones de Green retardadas y avanzadas satisfacen ecuaciones de Dyson estándar.

A.7. Ejemplo: El cálculo de la corriente

He optado por presentar la derivación de la fórmula de Meir y Wingreen para la corriente en sistemas mesoscópicos [Meir and Wingreen, 1992] como un ejemplo para el empleo de todas estas técnicas de no equilibrio. En el contexto de los problemas de transporte, una expresión general para la corriente que es válida en la presencia de regiones interactuantes se puede derivar en términos de funciones de Green de no equilibrio.

El Hamiltoniano

Con el fin de describir las propiedades de transporte, el sistema se puede separar en varias partes: dos reservorios de electrones (izquierda y derecha o fuente y sumidero) y un conductor central acoplado a estos reservorios a través de cables conductores. Puede ser descrito con el Hamiltoniano

$$H = H_L + H_R + H_C + H_{MIX},$$

donde H_ν representa los cables a izquierda ($\nu = L$) y derecha $\nu = R$, H_C es el Hamiltoniano que describe al conductor central y H_{MIX} representa el acoplamiento entre las tres partes. Más explícitamente,

$$H = \sum_{k, \nu, \sigma} \epsilon_{k, \nu, \sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma} + H_C(\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}) + \sum_{k\sigma\nu n} \left(V_{k\nu n\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n + H.c. \right),$$

donde $\epsilon_{k,\nu,\sigma} = \epsilon_{k,\sigma} - \mu_\nu$ y los operadores $c_{k\nu\sigma}^\dagger$ ($c_{k\nu\sigma}$) representan la creación (destrucción) de un electrón con momento k y espín σ en el cable ν . El conductor central se describe en términos de un conjunto completo y ortonormal de operadores $\{d_n^\dagger, d_n\}$. Finalmente $V_{k\nu n\sigma}$ es el coeficiente de acoplamiento relacionado con la tasa a la que electrones entran o salen del conductor central desde o hacia los cables.

La corriente

La corriente que fluye desde el cable a la izquierda al conductor central puede ser calculada como la tasa de cambio de la carga total

$$I_L = -e\langle \dot{N}_L \rangle,$$

donde $N_L = \sum_{k,\sigma} c_{kL\sigma}^\dagger c_{kL\sigma}$ es el número total de electrones en el reservorio y en donde

$$\dot{N}_L(t) = -\frac{i}{\hbar} [N_L(t), H].$$

Se puede observar que $[N_L, H_L] = [N_L, H_R] = [N_L, H_C] = 0$ y por lo tanto

$$\dot{N}_L = -\frac{i}{\hbar} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} c_{kL\sigma}^\dagger d_n - V_{kLn\sigma}^* d_n^\dagger c_{kL\sigma} \right).$$

Por lo tanto, la corriente de la izquierda es

$$I_L = \frac{ie}{\hbar} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} \langle c_{kL\sigma}^\dagger d_n \rangle - V_{kLn\sigma}^* \langle d_n^\dagger c_{kL\sigma} \rangle \right),$$

que viene dada por los valores de expectación: $\langle c_{kL\sigma}^\dagger d_n \rangle$ y $\langle d_n^\dagger c_{kL\sigma} \rangle$. A partir de la introducción previa de la Sec. A.6, se puede reconocer que se trata de dos funciones de Green menores

$$\begin{aligned} G_{n,kL\sigma}^<(t, t') &= i\langle c_{kL\sigma}^\dagger(t') d_n(t) \rangle, \\ G_{kL\sigma,n}^<(t, t') &= i\langle d_n^\dagger(t) c_{kL\sigma}(t') \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

y la corriente resulta

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} G_{n,kL\sigma}^<(0) - V_{kLn\sigma}^* G_{kL\sigma,n}^<(0) \right).$$

Es conveniente introducir la transformada de Fourier,

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{k,\sigma,n} \left(V_{kLn\sigma} G_{n,kL\sigma}^<(\omega) - V_{kLn\sigma}^* G_{kL\sigma,n}^<(\omega) \right). \quad (\text{A.54})$$

El cálculo de las propiedades de transporte es un problema de no equilibrio. El acoplamiento puede ser tomado como una perturbación. En ausencia de acoplamiento, el sistema está en un estado no perturbado con los

reservorios y el conductor central desconectados. No hay corriente aunque los reservorios tengan eventualmente diferente potencial electroquímico. Cuando las perturbaciones se encienden adiabáticamente hay un régimen transitorio y, finalmente, una corriente estacionaria se establece fluyendo de izquierda a derecha a través del conductor central. La corriente depende de las tasas de entrada y salida del conductor central. Estas tasas se dan en términos de funciones de Green.

Las funciones de Green de la Ec. (A.53) se pueden expresar en términos de las propiedades del conductor central y el acoplamiento a los cables. Esto se hace con la ayuda de la teoría de perturbaciones fuera de equilibrio.

La ecuación de Dyson diagramática

El Hamiltoniano se puede separar como $H = H_0 + H_1$, donde

$$H_0 = \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma} + H_C(\{d_n^\dagger\}, \{d_n\})$$

$$H_1 = \sum_{k\sigma\nu n} \left(V_{k\nu n\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n + H.c. \right),$$

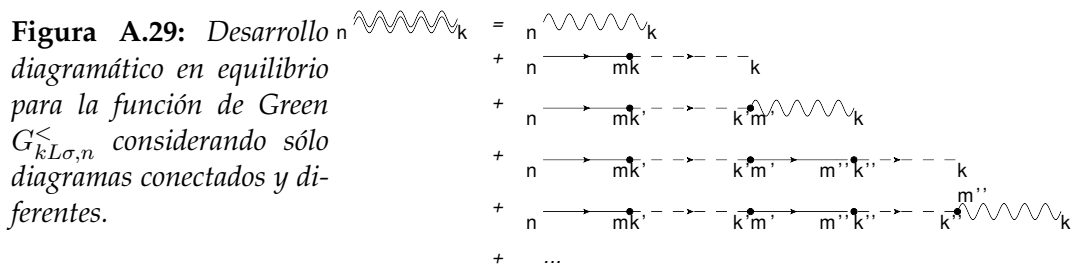
y H_1 es tratado como una perturbación. La función de Green

$$G_{kL\sigma,n}^<(t) = i \langle d_n^\dagger(0) c_{kL\sigma}(t) \rangle,$$

se puede calcular como en la Ec. (A.48)

$$G_{kL\sigma,n}^<(t) = i \sum_n (-i)^n \int ds_1 \cdots \int ds_n \langle T_C \hat{d}_n^\dagger(0) \hat{H}_1(s_1) \cdots \hat{H}_1(s_n) c_{kL\sigma}(t) \rangle_0,$$

teniendo en cuenta sólo los diagramas conectados y topológicamente diferentes. En vez de ir hacia adelante con el cálculo de no equilibrio, se puede derivar una ecuación de Dyson de equilibrio y luego traducirla al contorno de Keldysh. La expansión diagramática para la función de Green se muestra en la Fig. A.29.



La función de Green $G_{kL\sigma,n}^<$ se representa con una doble línea ondulada. La función de Green desnuda para los electrones de conducción se representa con una flecha de línea discontinua y para el conductor central con una flecha de línea continua. Los vértices se pueden construir a partir de la forma de la perturbación H_1 . Hay dos contribuciones: $c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n$ y $d_n^\dagger c_{k\nu\sigma}$ que

describen procesos $n \rightarrow k$ y $k \rightarrow n$, es decir, desde el conductor central a los cables y al contrario.

Dado que en H_0 no hay acoplamiento entre el conductor central y los cables, la función de Green no perturbada dada por la contracción $\langle d_n^\dagger(0) c_{kL\sigma}(t) \rangle_0$ es cero. Además, todos los órdenes pares son cero. Es posible factorizar el desarrollo diagramático para terminar con una expresión compacta como se muestra en la Fig. A.30. La función de Green vestida se puede calcular en términos del propagador de los electrones de conducción y el propagador vestido del conductor central (línea continua doble).

Figura A.30: Expresión compacta para el desarrollo diagramático en equilibrio de $G_{kL\sigma,n}^<$.

$$n \text{ --- wavy line --- } k = n \text{ --- double line --- } m \text{ --- dot --- } k$$

La traducción al contorno de Keldysh se puede realizar teniendo en cuenta que el vértice puede estar tanto en la parte superior como en la parte inferior. Esto conduce a dos diagramas diferentes como se muestra en la Fig. A.31.

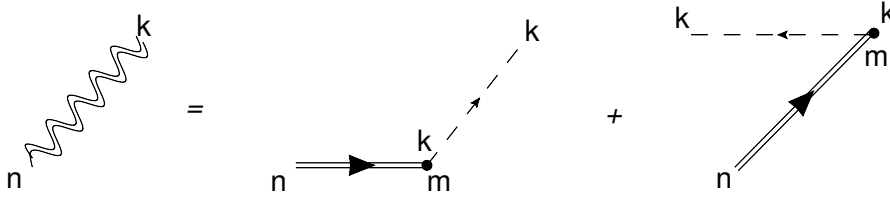


Figura A.31: Expresión diagramática en el contorno de Keldysh.

La expresión analítica

La expresión analítica de los diagramas se puede encontrar teniendo en cuenta en primer lugar el primer orden,

$$G_{kL\sigma,n}^{<(1)}(t) = i(-i) \sum_{k'\sigma'\nu'm} V_{k'\nu'm\sigma'} \int ds_1 \langle T_C \hat{d}_n^\dagger(0) \hat{c}_{k'\nu'\sigma'}^\dagger(s_1) \hat{d}_m(s_1) c_{kL\sigma}(t) \rangle_0,$$

donde, (a) si $s_1 \in C_1$,

$$G_{kL\sigma,n}^{<(1a)}(t) = i(-i) \sum_{k'\sigma'\nu'm} V_{k'\nu'm\sigma'} \int dt_1 \langle \tilde{T} \hat{d}_m(t_1) \hat{d}_n^\dagger(0) \rangle_0 \langle \hat{c}_{k'\nu'\sigma'}^\dagger(t_1) c_{kL\sigma}(t) \rangle_0,$$

y (b) si $s_1 \in C_2$,

$$G_{kL\sigma,n}^{<(1b)}(t) = -i(-i) \sum_{k'\sigma'\nu'm} V_{k'\nu'm\sigma'} \int dt_1 \langle \hat{d}_n^\dagger(0) \hat{d}_m(t_1) \rangle_0 \langle T c_{kL\sigma}(t) \hat{c}_{k'\nu'\sigma'}^\dagger(t_1) \rangle_0,$$

donde el signo menos viene del cambio de $\int_{-\infty}^{-\infty} \rightarrow -\int_{-\infty}^{\infty}$. Estas dos contribuciones se pueden escribir en términos de funciones de Green no perturbadas,

$$G_{kL\sigma,n}^{<(1)}(t) = \sum_{k'\sigma'\nu'm} V_{k'\nu'm\sigma'} \int dt_1 \left[g_{m,n}^{\tilde{T}}(t_1) g_{kL\sigma,k'\nu'\sigma'}^{<}(t-t_1) - g_{m,n}^{<}(t_1) g_{kL\sigma,k'\nu'\sigma'}^T(t-t_1) \right],$$

y se pueden simplificar teniendo en cuenta el carácter diagonal de H_0 ,

$$G_{kL\sigma,n}^{<(1)}(t) = \sum_m V_{kLm\sigma} \int dt_1 \left[g_{m,n}^{\tilde{T}}(t_1) g_{kL\sigma}^{<}(t-t_1) - g_{m,n}^{<}(t_1) g_{kL\sigma}^T(t-t_1) \right].$$

La expresión analítica de los diagramas de la Fig. A.31 puede obtenerse reemplazando la función de Green desnuda del conductor central por la vestida

$$G_{kL\sigma,n}^{<}(t) = \sum_m V_{kLm\sigma} \int dt_1 \left[g_{m,n}^{\tilde{T}}(t_1) g_{kL\sigma}^{<}(t-t_1) - G_{m,n}^{<}(t_1) g_{kL\sigma}^T(t-t_1) \right].$$

La transformada de Fourier resulta

$$G_{n,kL\sigma}^{<}(\omega) = \sum_m V_{kLm\sigma}^* \left[g_{kL\sigma}^{<}(\omega) G_{n,m}^T(\omega) - g_{kL\sigma}^{\tilde{T}}(\omega) G_{n,m}^{<}(\omega) \right].$$

La otra función de Green que se necesita para calcular la corriente en la Ec. (A.54) puede encontrarse en forma similar

$$G_{n,kL\sigma}^{<}(\omega) = \sum_m V_{kLm\sigma}^* \left[g_{kL\sigma}^{<}(\omega) G_{n,m}^T(\omega) - g_{kL\sigma}^{\tilde{T}}(\omega) G_{n,m}^{<}(\omega) \right].$$

Las funciones de Green ordenada y anti-ordenadas temporales pueden ser relacionadas con las funciones de Green avanzadas y retardadas por medio de las propiedades discutidas en la Sec. A.6 entre los propagadores de Keldysh ($G^r = G^T - G^{<}$, $G^a = G^{<} - G^{\tilde{T}}$ y $G^> = G^r - G^a + G^{<}$),

$$G_{kL\sigma,n}^{<}(\omega) = \sum_m V_{kLm\sigma} \left[G_{m,n}^{<}(\omega) [g^r + g^{<}]_{kL\sigma}(\omega) - [G^{<} - G^a]_{m,n}(\omega) g_{kL\sigma}^{<}(\omega) \right]$$

$$G_{n,kL\sigma}^{<}(\omega) = \sum_m V_{kLm\sigma}^* \left[g_{kL\sigma}^{<}(\omega) [G^r + G^{<}]_{n,m}(\omega) - [g^{<} - g^a]_{kL\sigma}(\omega) G_{n,m}^{<}(\omega) \right].$$

Al final del análisis perturbativo, las funciones de Green de la Ec. (A.53) que son necesarias para el cálculo de la corriente se escriben en términos de un propagador de los electrones de conducción y un propagador vestido para el conductor central. Este propagador puede ser muy difícil de encontrar en un problema interactuante. Utilizando estas funciones de Green en la expresión de la corriente de la Ec. (A.54) y reorganizando un poco

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{k,\sigma,n,m} V_{kLn\sigma} V_{kLm\sigma}^* (g_{kL\sigma}^{<} [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a] - G_{n,m}^{<} [g_{kL\sigma}^r - g_{kL\sigma}^a]).$$

La corriente: expresión final

Una mayor simplificación en la fórmula para la corriente se puede lograr teniendo en cuenta que los propagadores desnudos para los electrones de conducción están relacionados con las propiedades de los reservorios:

$$\begin{aligned} g_{kL\sigma}^<(\omega) &= 2\pi i f_L(\omega) \delta(\omega - \epsilon_k), \\ (g_{kL\sigma}^r - g_{kL\sigma}^a)(\omega) &= -2\pi i \rho_{kL\sigma}(\omega), \end{aligned}$$

donde $f_L(\omega)$ es la distribución de Fermi del reservorio izquierdo y $\rho_{kL\sigma}(\omega) = \delta(\omega - \epsilon_k)$ es la densidad de estados por espín e impulso de los electrones de conducción. El acoplamiento se puede escribir como $V_{kLn\sigma} V_{kLm\sigma}^* = V_{Ln\sigma}(\omega) V_{Lm\sigma}^*(\omega) \delta(\omega - \epsilon_k)$. Teniendo en cuenta esto, la corriente resulta

$$I_L = \frac{ei}{h} \int d\omega \sum_{\sigma, n, m} 2\pi (V_{Ln\sigma} V_{Lm\sigma}^* \rho_{L\sigma})(\omega) (f_L [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a] + G_{n,m}^<)(\omega),$$

que es básicamente el resultado obtenido por Meir y Wingreen.

El acoplamiento al reservorio se puede condensar en una función llamada **matriz de hibridación** Γ^ν . Si la etiqueta n para el conductor central también incluye el espín, se puede definir como

$$\Gamma_{n,m}^\nu(\omega) = 2\pi V_{\nu n\sigma}(\omega) V_{\nu m\sigma}^*(\omega) \rho_{\nu\sigma}(\omega). \quad (\text{A.55})$$

En términos de esta función de la hibridación, la corriente es

$$I_L = \frac{ei}{h} \int d\omega \sum_{n,m} \Gamma_{n,m}^L(\omega) (f_L(\omega) [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a](\omega) + G_{n,m}^<(\omega)), \quad (\text{A.56})$$

que es una expresión general para calcular la corriente fuera de equilibrio, a temperatura finita y en sistemas que interactúan. Puesto que la corriente se conserva, $I = \frac{I_L - I_R}{2}$, por lo que finalmente

$$\begin{aligned} I &= \frac{ei}{2h} \int d\omega \sum_{n,m} \{ [\Gamma_{n,m}^L(\omega) f_L(\omega) - \Gamma_{n,m}^R(\omega) f_R(\omega)] [G_{n,m}^r - G_{n,m}^a](\omega) \\ &\quad + [\Gamma_{n,m}^L(\omega) - \Gamma_{n,m}^R(\omega)] G_{n,m}^<(\omega) \}. \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

La corriente depende del acoplamiento entre el conductor central y los cables a través de la matriz de hibridación $\Gamma_{n,m}^\nu$. Pero las propiedades de transporte están dadas principalmente por el conductor central. Las propiedades de este conductor determinan las funciones de Green retardadas, avanzadas y menores. La diferencia $G_{n,m}^r - G_{n,m}^a$ es proporcional a la **densidad de estados del conductor** y $G_{n,m}^<$ está relacionada con la **ocupación del conductor**. Dependiendo del Hamiltoniano H_C , estas funciones de Green tienen que ser encontrada en presencia de los cables.

A.8. La corriente en un conductor no interactuante

Como caso particular, la corriente se puede obtener para un conductor no interactuante. En este caso,

$$H_0 = \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma} + \sum_n E_n d_n^\dagger d_n,$$

donde los operadores d_n^\dagger describen los niveles de energía E_n del conductor, n indica también el estado de espín. El problema es muy similar al del nivel resonante discutido en la Sec. A.3. Los diagramas correspondientes al propagador no perturbado para el electrón de conducción y para el conductor central se muestran en la Fig. A.32. Los vértices $V_{k\nu n\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger d_n$ y $V_{k\nu n\sigma}^* d_n^\dagger c_{k\nu\sigma}$ se adjuntan en la figura.

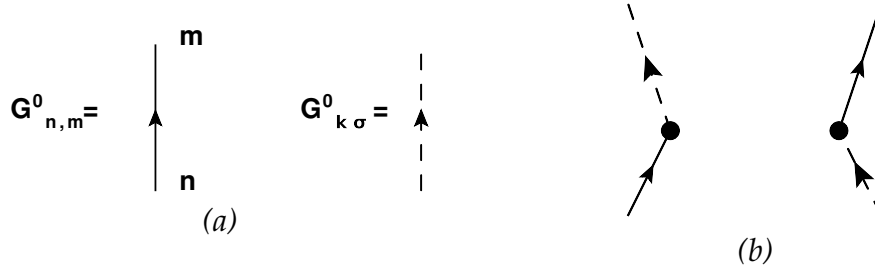


Figura A.32: Representación diagramática de los (a) propagadores desnudos y (b) los vértices.

En equilibrio, el desarrollo diagramático para la función de Green $G_{n,m}$ es como en el problema del nivel resonante mostrado en la Fig. A.12. La ecuación de Dyson diagramática se muestra en la Fig. A.33.

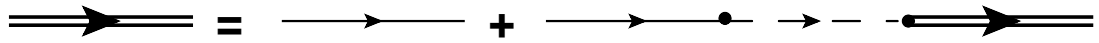


Figura A.33: Ecuación de Dyson para el problema no interactuante.

La expresión analítica es

$$G_{n,m} = g_{n,m} + \sum_{m,m'} g_{n,m'} \Sigma_{m',m} G_{m,m},$$

donde $\Sigma_{m',m}$ es la auto-energía. De acuerdo con el teorema de Langreth (ver Sec. A.6), las funciones de Green retardada y avanzada satisfacen

$$G_{n,m}^{r,a} = g_{n,m}^{r,a} + \sum_{m,m'} g_{n,m'}^{r,a} \Sigma_{m',m}^{r,a} G_{m,m}^{r,a},$$

y la menor $G_{n,m}^< = g_{n,m}^< + \sum_{m,m'} (g_{n,m'} \Sigma_{m',m} G_{m,m})^<$, es decir,

$$G_{n,m}^< = g_{n,m}^< + \sum_{m,m'} [g_{n,m'}^< \Sigma_{m',m}^a G_{m,m}^a + g_{n,m'}^r \Sigma_{m',m}^< G_{m,m}^a + g_{n,m'}^r \Sigma_{m',m}^r G_{m,m}^<].$$

En términos del lenguaje matricial (en el índice m', m),

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{g}^< + \mathbf{g}^< \Sigma^a \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{G}^<.$$

Esta expresión puede ser reorganizada para señalar que después de una iteración (sustituyendo $\mathbf{G}^<$ por $\mathbf{g}^< + \mathbf{g}^< \Sigma^a \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a$ en el último término),

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^< &= \mathbf{g}^< + \mathbf{g}^< \Sigma^a \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a \\ &+ \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{g}^< + \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{g}^< \Sigma^a \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{g}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{G}^< \\ &= (1 + \Sigma^r \mathbf{g}^r) \mathbf{g}^< (1 + \Sigma^a \mathbf{G}^a) + (\mathbf{g}^r + \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{g}^r) \Sigma^< \mathbf{G}^a + \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{g}^r \Sigma^r \mathbf{G}^<, \end{aligned}$$

Por lo tanto, se puede inferir el resultado de las iteraciones sucesivas

$$\mathbf{G}^< = (1 + \Sigma^r \mathbf{G}^r) \mathbf{g}^< (1 + \Sigma^a \mathbf{G}^a) + \mathbf{G}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a.$$

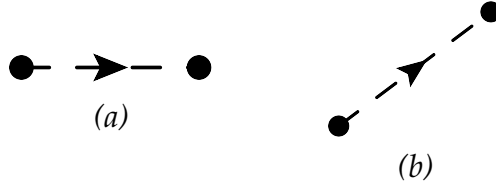
Se puede demostrar que si el estado no perturbado es no interactuante, en el estado estacionario el término proporcional a $\mathbf{g}^<$ se anula. La componente menor se puede expresar en una forma muy compacta,

$$\mathbf{G}^< = \mathbf{G}^r \Sigma^< \mathbf{G}^a, \quad (\text{A.58})$$

y lo mismo vale para las mayores cambiando $< \rightarrow >$.

Con el fin de resumir, para el cálculo de la corriente, las funciones de Green retardada, avanzada y menor son necesarias. El problema se reduce al cálculo de tres auto-energías: la avanzada, la retardada y las menores. Los diagramas de auto-energía se muestran en la Fig. A.34.

Figura A.34: Auto-energía (a) retardada y (b) menor para el problema no interactuante.



Las auto-energías retardadas y avanzadas pueden obtenerse de

$$\Sigma_{m',m}(\omega) = \sum_{k\nu} \frac{V_{k\nu m'\sigma} V_{k\nu m\sigma}^*}{\omega - \epsilon_k},$$

cambiando $\omega \rightarrow \omega \pm i\eta$, y luego haciendo $\eta \rightarrow 0^+$,

$$\Sigma_{m',m}^{r,a}(\omega) = \wp \sum_{k\nu} V_{k\nu m'\sigma} V_{k\nu m\sigma}^* \frac{1}{\omega - \epsilon_k} \mp i\pi \sum_{k\nu} V_{k\nu m'\sigma} V_{k\nu m\sigma}^* \delta(\omega - \epsilon_k).$$

La parte real de la auto-energía $\Sigma_{m',m}^{\mathbb{R},a}$ renormaliza la energía del nivel. Para acoplamiento independientes del impulso

$$\sum_{k\nu} V_{k\nu m'\sigma} V_{k\nu m\sigma}^* \delta(\omega - \epsilon_k) = \sum_{\nu} V_{\nu m'\sigma} V_{\nu m\sigma}^* \sum_k \delta(\omega - \epsilon_k) = \sum_{\nu} V_{\nu m'\sigma} V_{\nu m\sigma}^* \rho_{\nu\sigma}(\omega),$$

por ende

$$\Sigma_{m',m}^{r,a}(\omega) = \Sigma_{m',m}^{\mathbb{R}r,a} \mp i\pi \sum_{\nu} V_{k\nu m'\sigma} V_{k\nu m\sigma}^* \rho_{\nu\sigma}(\omega).$$

Introduciendo la matriz de hibridación definida en la Ec. (A.55),

$$\Sigma_{m',m}^{r,a}(\omega) = \Sigma_{m',m}^{\mathbb{R}r,a} \mp \frac{i}{2} \sum_{\nu} \Gamma_{m'm}^{\nu}. \quad (\text{A.59})$$

La auto-energía menor se puede calcular de la forma del diagrama de la Fig. A.34(b). La expresión analítica es

$$\Sigma_{m',m}^{<}(\omega) = \sum_{k\nu} V_{k\nu m'\sigma} V_{k\nu m\sigma}^* g_{k\nu\sigma}^{<}(\omega),$$

donde $g_{kL\sigma}^{<}(\omega) = 2\pi i f_L(\omega) \delta(\omega - \epsilon_k)$, así

$$\Sigma_{m',m}^{<}(\omega) = 2\pi i \sum_{\nu} V_{\nu m'\sigma} V_{\nu m\sigma}^* f_{\nu}(\omega) \rho_{\nu}(\omega).$$

Introduciendo la matriz de hibridación,

$$\Sigma_{m',m}^{<}(\omega) = i \sum_{\nu} \Gamma_{m'm}^{\nu} f_{\nu}(\omega). \quad (\text{A.60})$$

La auto-energía mayor se puede encontrar de forma similar teniendo en cuenta que $g_{kL\sigma}^{>}(\omega) = -2\pi i (1 - f_L(\omega)) \delta(\omega - \epsilon_k)$,

$$\Sigma_{m',m}^{>}(\omega) = -i \sum_{\nu} \Gamma_{m'm}^{\nu} (1 - f_{\nu}(\omega)). \quad (\text{A.61})$$

Las auto-energías avanzados, retardados, menores y mayores se han calculado. Usando la relación de la Ec. (A.45), $\mathbf{G}^r - \mathbf{G}^a = \mathbf{G}^{>} - \mathbf{G}^{<}$ y el resultado de la Ec. (A.58),

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^r - \mathbf{G}^a &= \mathbf{G}^r (\Sigma^{>} - \Sigma^{<}) \mathbf{G}^a \\ &= -i \sum_{\nu} \mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^{\nu} \mathbf{G}^a. \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

Esta relación y la auto-energía menor de la Ec. (A.60) se pueden introducir en la expresión de la corriente dada en la Ec. (A.57)

$$\begin{aligned} I &= \frac{ei}{2h} \int d\omega \sum_{n,m} \left\{ [\Gamma_{n,m}^L(\omega) f_L(\omega) - \Gamma_{n,m}^R(\omega) f_R(\omega)] (-i) \sum_{\nu} (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^{\nu} \mathbf{G}^a)_{n,m} \right. \\ &\quad \left. + [\Gamma_{n,m}^L(\omega) - \Gamma_{n,m}^R(\omega)] (i) \sum_{\nu} f_{\nu}(\omega) (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^{\nu} \mathbf{G}^a)_{n,m} \right\}, \end{aligned}$$

lo que conduce a

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{2h} \int d\omega \sum_{n,m} \left\{ \Gamma_{n,m}^L(\omega) f_L(\omega) (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^R \mathbf{G}^a)_{n,m} - \Gamma_{n,m}^R(\omega) f_R(\omega) (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^L \mathbf{G}^a)_{n,m} \right. \\ &\quad \left. - \Gamma_{n,m}^L(\omega) f_R(\omega) (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^R \mathbf{G}^a)_{n,m} - \Gamma_{n,m}^R(\omega) f_L(\omega) (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^L \mathbf{G}^a)_{n,m} \right\}, \end{aligned}$$

y simplemente arreglando un poco,

$$I = \frac{e}{2h} \int d\omega (f_L - f_R)(\omega) \sum_{n,m} \{ \Gamma_{n,m}^L (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^R \mathbf{G}^a)_{n,m} + \Gamma_{n,m}^R (\mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^L \mathbf{G}^a)_{n,m} \} (\omega).$$

Para acoplamientos reales, $\Gamma_{n,m}^R = \Gamma_{m,n}^R$ y $\mathbf{G}_{n,m}^{a,r} = \mathbf{G}_{m,n}^{a,r}$, por lo tanto

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega (f_L(\omega) - f_R(\omega)) \text{Tr}(\mathbf{G}^a \mathbf{\Gamma}^R \mathbf{G}^r \mathbf{\Gamma}^L). \quad (\text{A.63})$$

Definiendo el **coeficiente de transmisión** como

$$t_{\sigma,\sigma'} \doteq 2\pi \sum_{n,m} \rho_{L\sigma}^{1/2} \rho_{R\sigma'}^{1/2} V_{L\sigma,n}^* G_{n,m}^r V_{R\sigma',m}, \quad (\text{A.64})$$

la ecuación de la corriente se reduce a la expresión de Landauer

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \text{Tr} [\mathbf{t} \mathbf{t}^\dagger(\omega)]. \quad (\text{A.65})$$

La aproximación *non-crossing*

En la Sec. A.5 del **Apéndice A** se presenta una derivación diagramática de la aproximación *non-crossing* (NCA). La derivación se trató como un ejemplo del empleo de la teoría de perturbaciones a temperatura finita como se explica en la Sec. A.4. Dejé todos los detalles técnicos para este apéndice separado. Aquí se derivan las expresiones analíticas, se obtiene el propagador físico a partir de los de las partículas auxiliares y se discute la proyección sobre el subespacio de $Q = 1$.

B.1. El Hamiltoniano y las expresiones diagramáticas

La NCA es una aproximación para resolver el modelo de Anderson. Como se explica en la Sec. A.5 el Hamiltoniano del modelo

$$H_{AIM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} \\ + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + H.c. \right),$$

se reescribe en términos de partículas auxiliares por medio de la identificación

$$\begin{cases} |0\rangle \rightarrow b^\dagger |vac\rangle \\ |\sigma\rangle \rightarrow f_{\sigma}^\dagger |vac\rangle, \end{cases}$$

donde f_{σ}^\dagger es el operador del pseudo-fermión y b^\dagger es el bosón vacío; $|vac\rangle$ es un nuevo vacío. La restricción

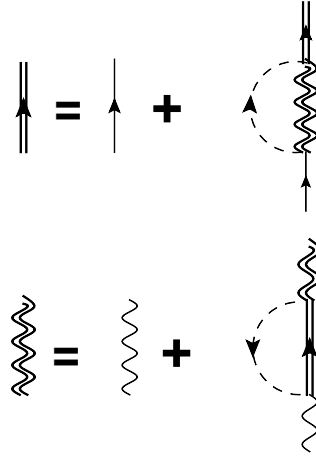
$$Q = b^\dagger b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} = 1,$$

se introduce para asegurar la repulsión de Coulomb infinita. En este límite, la doble ocupación está prohibida y $|0\rangle$, $|\sigma\rangle$ son las ocupaciones relevantes. Esto se tiene en cuenta a través de un multiplicador de Lagrange $K = H + \lambda Q$. El Hamiltoniano se separa como $K = K_0 + K_1$, con

$$K_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} (E_d + \lambda) f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \lambda b^\dagger b, \\ K_1 = \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger b^\dagger f_{\sigma} + H.c. \right),$$

donde K_1 es tratado como una perturbación. El desarrollo diagramático para las funciones de Green del pseudo-fermión (flecha de doble línea continua) y del bosón (doble línea ondulada) conduce al conjunto de ecuaciones auto-consistentes que se muestran en la Fig. B.1. Estas son las ecuaciones de tipo Dyson donde la auto-energía del bosón depende de la función de Green vestida del pseudo-fermión y la función de Green del pseudo-fermión depende a su vez del propagador del bosón vestido.

Figura B.1: Ecuaciones diagramáticas NCA para las funciones de Green del pseudo-fermión y el bosón.



Presento ahora los detalles de la traducción de estos diagramas para obtener una expresión analítica. En el dominio espectral, para la partícula auxiliar a ($= b, \sigma$), hay una función de Green $G_a^\lambda(\omega)$, donde λ está ahí para recordar el hecho de que estas funciones de Green se evalúan en el ensamble gran canónico con un número arbitrario de partículas en la impureza. En la Sec. B.4 los detalles de la proyección en el espacio con $Q = 1$ se discuten. La ecuación de Dyson se puede escribir como

$$G_a^\lambda(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_a - \lambda - \Sigma_a^\lambda(\omega)}, \quad (\text{B.1})$$

donde $\epsilon_b = 0$, $\epsilon_\sigma = E_d$ y Σ_a^λ es la auto-energía de la partícula auxiliar a .

B.2. Expresiones analíticas

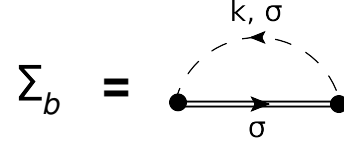
Las expresiones analíticas para los diagramas de la Fig. B.1 se derivan en el dominio de frecuencia.

La auto-energía del bosón

El diagrama de auto-energía para el bosón se muestra en la Fig. B.2.

Hay dos propagadores involucrados en esta “diagrama burbuja”: el propagador de los electrones de conducción $G_{k\sigma}^0$ y el propagador vestido del pseudo-fermión G_σ^λ . La traducción se puede hacer como sigue:

Figura B.2: Auto-energía del bosón. Hay dos propagadores: la flecha de doble línea continua (línea simple discontinua) corresponde a la función de Green vestida del pseudo-fermión (a la función de Green desnuda de los electrones de conducción); y dos vértices.



- 1- Los propagadores se identifican con el índice adecuado: el pseudo-fermión con σ y los electrones de conducción con $k\sigma$.

$$G_{\sigma}^{\lambda}()G_{k\sigma}^0(),$$

- 2- Hay un $V_{k\sigma}$ o $V_{k\sigma}^*$ por cada vértice. Energía, impulso y espín deben ser conservados en cada vértice.

$$|V_{k\sigma}|^2 G_{\sigma}^{\lambda}()G_{k\sigma}^0(),$$

- 3- La auto-energía es una función de $i\omega_n$, esto es fijo. Si el electrón de conducción tiene una parte de la energía $i\nu_n$, entonces la energía del pseudo-fermión está fijada por la conservación (tiene que ser compatible en el vértice de acuerdo con la dirección de los propagadores).

$$|V_{k\sigma}|^2 G_{\sigma}^{\lambda}(i\omega_n + i\nu_n)G_{k\sigma}^0(i\nu_n),$$

- 4- Hay una suma sobre todos los grados de libertad internos: $k, i\nu_n, \sigma$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{\sigma} \sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_{\sigma}^{\lambda}(i\omega_n + i\nu_n)G_{k\sigma}^0(i\nu_n),$$

donde $\frac{1}{\beta}$ proviene de la suma sobre frecuencias imaginarias en la Ec. (A.21).

- 5- Hay un factor $(-1)^{m+F}$, donde F es el número de bucles fermiónicos y m

para bosones, es la mitad del número de vértices

para fermiones, es el número de propagadores bosónicos internos.

Por tanto,

$$\Sigma_b^{\lambda}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{\sigma} \sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_{\sigma}^{\lambda}(i\omega_n + i\nu_n)G_{k\sigma}^0(i\nu_n), \quad (\text{B.2})$$

Hay una técnica para hacer la suma sobre $i\nu_n$. Esto se llama una suma de **Matsubara**. Teniendo en cuenta que el propagador desnudo del electrón de conducción es (véase la Ec. (A.32) y la derivación en la Sec. A.4)

$$G_{k\sigma}^0(i\nu_n) = \frac{1}{i\nu_n - \epsilon_k},$$

y utilizando la **representación espectral** de la función de Green del pseudo-fermión (véase la Ec. (A.27)),

$$G_{\sigma}^{\lambda}(i\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\rho_{\sigma}^{\lambda}(x)}{i\omega - x},$$

la expresión analítica a partir del diagrama se puede escribir como,

$$\Sigma_b^{\lambda}(i\omega_n) = \sum_{k\sigma} |V_{k\sigma}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho_{\sigma}^{\lambda}(x) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - x} \frac{1}{i\nu_n - \epsilon_k} \right).$$

La expresión entre paréntesis

$$S = \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - x} \frac{1}{i\nu_n - \epsilon_k},$$

es la suma de Matsubara en la frecuencia fermiónica $i\nu_n$. Esta suma se puede hacer en el plano complejo. Para este fin, se introduce la función auxiliar en la variable compleja z

$$h(z) = \frac{f(z)}{i\omega_n + z - x} \frac{1}{z - \epsilon_k},$$

donde $f(z) = [e^{\beta z} + 1]^{-1}$ es la función de distribución de Fermi. Esta función tiene polos cuando $e^{\beta z} = -1$, es decir, por $z_n = (2n + 1)\pi/\beta$. La función $h(z)$ también tiene polos simples en $z_{\omega} = -i\omega_n + x$ y $z_k = \epsilon_k$. Con excepción de un número infinito de polos, $h(z)$ es analítica en el plano complejo. Por tanto

$$\oint dz h(z) = 0 = 2\pi \sum_i \text{Res}_i(h(z)),$$

donde la suma es sobre todos los residuos. Los residuos en los polos de las funciones de Fermi pueden ser calculados como

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow z_n} h(z)(z - z_n) &= \lim_{z \rightarrow z_n} \frac{(z - z_n)}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{i\omega_n + z - x} \frac{1}{z - \epsilon_k} \\ &= \left(\frac{-1}{\beta} \right) \frac{1}{i\omega_n + z_n - x} \frac{1}{z_n - \epsilon_k}, \end{aligned}$$

mientras que los otros dos residuos son

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow z_{\omega}} h(z)(z - z_{\omega}) &= f(z_{\omega}) \frac{1}{z_{\omega} - \epsilon_k} = f(-i\omega_n + x) \frac{1}{-i\omega_n + x - \epsilon_k}, \\ \lim_{z \rightarrow z_k} h(z)(z - z_k) &= f(z_k) \frac{1}{i\omega_n + z_k - x} = f(\epsilon_k) \frac{1}{i\omega_n + \epsilon_k - x}. \end{aligned}$$

Dado que la suma sobre todos los residuos es cero,

$$\frac{1}{\beta} \sum_{z_n} \frac{1}{i\omega_n + z_n - x} \frac{1}{z_n - \epsilon_k} = \frac{f(-i\omega_n + x)}{-i\omega_n + x - \epsilon_k} + \frac{f(\epsilon_k)}{i\omega_n + \epsilon_k - x},$$

que es la suma que se necesita recordando que $z_n = (2n + 1)\pi/\beta$ ya que corresponde a una frecuencia fermiónica. Por ende

$$S = \frac{f(x - i\omega_n)}{x - i\omega_n - \epsilon_k} + \frac{f(\epsilon_k)}{\epsilon_k + i\omega_n - x},$$

es el resultado de la suma del Matsubara. Usando esto en la Ec. (B.2), y observando que $f(x - i\omega_n) = f(x)$ ya que ω_n es una frecuencia bosónica,

$$\Sigma_b^\lambda(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_{k\sigma} |V_{k\sigma}|^2 \rho_\sigma^\lambda(x) \left[\frac{f(\epsilon_k)}{\epsilon_k + i\omega_n - x} - \frac{f(x)}{\epsilon_k + i\omega_n - x} \right]$$

donde el segundo término se anula en el límite de $\lambda \rightarrow \infty$, cuando se realiza la proyección al espacio físico $Q = 1$ (ver Sec. B.4 para más detalles). Recuperando de vuelta la función de Green de la representación espectral,

$$\Sigma_b^\lambda(i\omega_n) = \sum_{k\sigma} |V_{k\sigma}|^2 G_\sigma^\lambda(\epsilon_k + i\omega_n) f(\epsilon_k).$$

Introduciendo la función Delta, $\Delta_\sigma(x) = \pi \sum_k |V_{k\sigma}|^2 \delta(x - \epsilon_k)$,

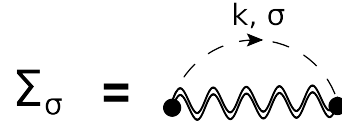
$$\boxed{\Sigma_b^\lambda(i\omega_n) = \frac{1}{\pi} \sum_\sigma \int dx \Delta(x) f(x) G_\sigma^\lambda(x + i\omega_n)}, \quad (\text{B.3})$$

que es la expresión para la auto-energía del bosón en NCA.

Auto-energía del pseudo-fermión

El diagrama burbuja de la auto-energía del pseudo-fermión se muestra en la Fig. B.3.

Figura B.3: Auto-energía del pseudo-fermión. Hay dos propagadores: el de línea doble ondulada (flecha con línea simple de trazos) corresponde a la función de Green vestida del bosón vacío (a la función de Green desnuda de los electrones de conducción); y dos vértices.



En el diagrama hay dos propagadores: uno que corresponde a los electrones de conducción $G_{k\sigma}^0$ y uno para el bosón vestido G_b^λ . Siguiendo el mismo procedimiento que antes:

- 1- Indexación: $G_b^\lambda() G_{k\sigma}^0()$,
- 2- Multiplicación por el valor del acoplamiento del vértice $|V_{k\sigma}|^2 G_b^\lambda() G_{k\sigma}^0()$,
- 3- Asignación de los argumentos de frecuencia: $|V_{k\sigma}|^2 G_b^\lambda(i\omega_n - i\nu_n) G_{k\sigma}^0(i\nu_n)$,

4- Suma sobre grados de libertad internos:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_b^\lambda(i\omega_n - i\nu_n) G_{k\sigma}^0(i\nu_n),$$

5- Multiplicación por el factor $(-1)^{m+F}$ ($= -1$ en este caso, ya que hay un propagador bosónico interno):

$$\Sigma_\sigma^\lambda(i\omega_n) = \frac{-1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_b^\lambda(i\omega_n - i\nu_n) G_{k\sigma}^0(i\nu_n).$$

Usando la representación espectral de la función de Green, $G_b^\lambda(i\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\rho_b(x)}{i\omega - x}$,

$$\Sigma_\sigma^\lambda(i\omega_n) = \sum_k |V_{k\sigma}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho_b^\lambda(x) \left(-\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{i\omega_n - i\nu_n - x} \frac{1}{i\nu_n - \epsilon_k} \right) \quad (\text{B.4})$$

y la suma Matsubara que debe calcularse es

$$S = \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{i\nu_n - i\omega_n + x} \frac{1}{i\nu_n - \epsilon_k},$$

en la frecuencia fermiónica $i\nu_n$. Como se hizo para el cálculo de la auto-energía del bosón,

$$S = \frac{f(\epsilon_k)}{\epsilon_k - i\omega_n + x} + \frac{f(i\omega_n - x)}{i\omega_n - x - \epsilon_k},$$

pero ahora $i\omega_n$ es una frecuencia fermiónica. Por lo tanto, $f(i\omega_n - x) = 1 + b(x)$, donde $b(x) = [e^{\beta x} - 1]^{-1}$ es la función de distribución de Bose-Einstein. La suma de Matsubara resulta

$$S = \frac{1}{i\omega_n - x - \epsilon_k} - \frac{f(\epsilon_k)}{i\omega_n - \epsilon_k - x} + \frac{b(x)}{i\omega_n - x - \epsilon_k},$$

donde el último término desaparece cuando se realiza la proyección. Insertando este resultado en la Ec. (B.4) y recuperando de nuevo la función de Green de la representación espectral

$$\Sigma_\sigma^\lambda(i\omega_n) = \sum_k |V_{k\sigma}|^2 G_b^\lambda(i\omega_n - x)(1 - f(\epsilon_k)).$$

Utilizando la definición de la función Delta, la auto-energía resultante del pseudo-fermión es

$$\Sigma_\sigma^\lambda(i\omega_n) = \frac{1}{\pi} \int dx \Delta(x)(1 - f(x))G_b^\lambda(i\omega_n - x). \quad (\text{B.5})$$

Se puede señalar que en contraste con la auto-energía para el bosón en la Ec. (B.3), no hay suma sobre el espín aquí. La combinación de la Ec. (B.1) con las Ecs. (B.3) y (B.5) forma el sistema de auto-consistente de la NCA.

B.3. La función de Green física

La aproximación *non-crossing* se utiliza para resolver el modelo de Anderson para el problema de la impureza. El punto de partida de la aproximación es la introducción de partículas auxiliares. El Hamiltoniano se reescribe en términos de partículas auxiliares y las funciones de Green se obtienen de un conjunto de ecuaciones diagramáticas auto-consistentes. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que las propiedades físicas no dependen directamente de las partículas auxiliares pero de la “función de Green física”

$$G_{d\sigma}^{\lambda}(\tau) = -\langle T_{\tau} d_{\sigma}(\tau) d_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle. \quad (\text{B.6})$$

Esta función de Green también se puede escribir en términos del bosón y el pseudo-fermión

$$G_{d\sigma}^{\lambda}(\tau) = -\langle T_{\tau} b^{\dagger}(\tau) f_{\sigma}(\tau) f_{\sigma}^{\dagger}(0) b(0) \rangle, \quad (\text{B.7})$$

y calcularse perturbativamente como

$$G_{d\sigma}^{\lambda}(\tau) = -\frac{\langle T_{\tau} \hat{U}(\beta, 0) \hat{b}^{\dagger}(\tau) \hat{f}_{\sigma}(\tau) \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(0) \hat{b}(0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}. \quad (\text{B.8})$$

La función de Green física es diferente de los otros propagadores calculados previamente.

A orden cero,

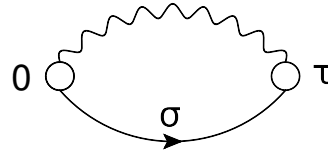
$$G_{d\sigma}^{\lambda(0)}(\tau) = -\langle T_{\tau} \hat{b}^{\dagger}(\tau) \hat{f}_{\sigma}(\tau) \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(0) \hat{b}(0) \rangle_0,$$

y la aplicación del teorema de Wick conduce a

$$G_{d\sigma}^{\lambda(0)}(\tau) = -\langle T_{\tau} \hat{b}^{\dagger}(\tau) \hat{b}(0) \rangle_0 \langle T_{\tau} \hat{f}_{\sigma}(\tau) \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle_0.$$

La función de Green física lleva la información del bosón y el pseudo-fermión, es una especie de convolución. Se representa en la Fig. B.4. Los puntos vacíos no son vértices, pero sólo los puntos de creación y destrucción de estas partículas auxiliares.

Figura B.4: Función de Green física calculada a orden cero en términos de las partículas auxiliares.



No hay contribuciones con un número impar de vértices. En el siguiente orden no trivial, $n = 2$, hay varias posibilidades, como se muestra en la Fig. B.5. Los operadores de $\hat{U}(\beta, 0)$ pueden ser:

- (a) contraídos con $\hat{b}^{\dagger}(\tau)$ y $\hat{b}(0)$,
- (b) contraídos con $\hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(\tau)$ y $\hat{f}_{\sigma}(0)$,

Figura B.5: Posibles diagramas para la función de Green física a segundo orden.

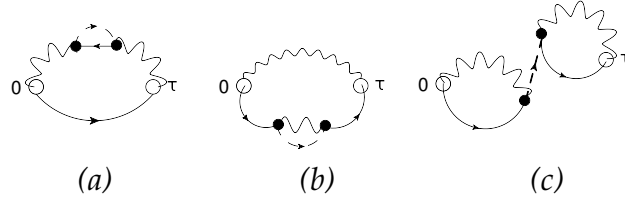
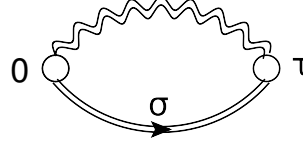


Figura B.6: Función de Green física vestida calculada en términos de las partículas auxiliares.

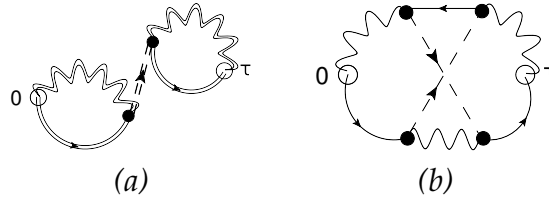


(c) o uno contraído con $\hat{b}^\dagger(\tau)$ y $\hat{f}_\sigma^\dagger(\tau)$; y el otro con $\hat{b}(0)$ y $\hat{f}_\sigma(0)$.

Los órdenes sucesivos aplicados como en el caso (a) o (b) conducen a los propagadores vestidos para las partículas auxiliares como se muestra en la Fig. B.6.

Como se muestra en la Fig. B.7(a) cuando se consideran varios órdenes en perturbaciones, se hace evidente que los diagramas como (c) son parte de una corrección del propagador para los electrones de conducción. Como ya se ha mencionado, esta corrección se anula cuando se realiza la proyección en el espacio con $Q = 1$. Los electrones de conducción no están vestidos dentro de la NCA. Existen otros diagramas posibles, como la que se muestra en la Fig. B.7(b), que son diagramas con cruces no considerados en la aproximación.

Figura B.7: (a) Corrección del propagador de los electrones de conducción. (b) Diagrama con cruce.



La función de Green física que se muestra en la Fig. B.6, es por lo tanto

$$G_{d\sigma}^\lambda(\tau) \stackrel{NCA}{=} -\langle T_\tau b^\dagger(\tau)b(0) \rangle \langle T_\tau f_\sigma(\tau)f_\sigma^\dagger(0) \rangle, \quad (\text{B.9})$$

lo que muestra explícitamente que dentro de la NCA no hay correlaciones entre el bosón y el pseudo-fermión.

Siguiendo el mismo procedimiento que se utiliza para escribir las expresiones analíticas de las auto-energías, la traducción del diagrama de la función de Green física es

$$G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{iq_n} G_\sigma^\lambda(iq_n + i\omega_n) G_b^\lambda(iq_n),$$

donde $i\omega_n$ es una frecuencia fermiónica y iq_n es una frecuencia bosónica. Usando la representación espectral

$$G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) = \int dx \int dy \rho_\sigma^\lambda(x) \rho_b^\lambda(y) \left(\frac{-1}{\beta} \sum_{iq_n} \frac{1}{iq_n + i\omega_n - x} \frac{1}{iq_n - y} \right),$$

donde la suma se Matsubara que se calcula es la expresión entre corchetes

$$S = \left(\frac{-1}{\beta} \sum_{iq_n} \frac{1}{iq_n + i\omega_n - x} \frac{1}{iq_n - y} \right).$$

Utilizando una función auxiliar en la complejo variable z , $g(z) = \frac{b(z)}{(iq_n + i\omega_n - x)(iq_n - y)}$, donde $b(x)$ es la función de distribución de Bose, se puede encontrar

$$S = \frac{-f(x)}{x - y - i\omega_n} + \frac{b(y)}{y - x + i\omega_n},$$

por ende

$$\begin{aligned} G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) &= - \int dx f(x) \rho_\sigma^\lambda(x) \int dy \frac{\rho_b^\lambda(y)}{x - y - i\omega_n} \\ &\quad + \int dy \rho_b^\lambda(y) b(y) \int dx \frac{\rho_\sigma^\lambda(x)}{y - x + i\omega_n} \\ \Rightarrow G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) &= - \int dx f(x) \rho_\sigma^\lambda(x) G_b^\lambda(x - i\omega_n) + \int dy \rho_b^\lambda(y) b(y) G_\sigma^\lambda(y + i\omega_n), \end{aligned}$$

y finalmente,

$$\boxed{G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) = \int dx [\rho_b^\lambda(x) b(x) G_\sigma^\lambda(x + i\omega_n) - f(x) \rho_\sigma^\lambda(x) G_b^\lambda(x - i\omega_n)]}, \quad (\text{B.10})$$

B.4. La proyección en el espacio de $Q = 1$

Dentro de la NCA, la condición de repulsión de Coulomb infinita se mantiene mediante la imposición de una restricción sobre el número total de partículas auxiliares en el nivel localizado

$$Q = b^\dagger b + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} = 1.$$

Esta restricción se tiene en cuenta con un multiplicador de Lagrange λ como $K = H + \lambda Q$. Las cantidades físicas relevantes son aquellas para las cuales $Q = 1$. La derivación diagramática de las ecuaciones de la NCA se ha hecho sin ninguna restricción en el número de partículas, como en un caso con potencial químico cero, donde el número de partículas es arbitrario. En algunas ocasiones, sin embargo, se indicó explícitamente que ciertos términos se anularían al tomar el límite y no se han incluido para simplificar las expresiones. En una primera instancia, durante la derivación de las ecuaciones diagramáticas en la Sec. A.5 se mencionó que el propagador de los electrones de conducción en no viste dentro de la NCA. Este hecho reduce el número de diagramas a ser considerados. Se argumentó que la auto-energía para los electrones de conducción se anula cuando se realiza la proyección en el subespacio con $Q = 1$. En una segunda instancia, en la derivación de

las expresiones analíticas de las auto-energías en la Sec. B.2 algunas contribuciones no se tuvieron en cuenta con el mismo argumento. Todos estos diagramas y contribuciones pueden mantenerse hasta el final de los cálculos, pero no tiene sentido, ya que representan procesos que no son “físicos”. Presento ahora una manera que permite realizar la proyección en el espacio de $Q = 1$.

El truco de Abrikosov

Un valor de expectación en el ensamble gran canónico (señalado con G) es

$$\langle A \rangle_G = \frac{1}{Z_G} \text{Tr} [e^{-\beta K} A],$$

donde $Z_G = \text{Tr} [e^{-\beta K}]$ es la gran función de partición. Escribiendo explícitamente $K = H + \lambda Q$,

$$\langle A \rangle_G = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} e^{-\beta \lambda Q} A]}{\text{Tr} [e^{-\beta H} e^{-\beta \lambda Q}]} = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} \zeta^Q A]}{\text{Tr} [e^{-\beta H} \zeta^Q]},$$

donde $\zeta = e^{-\beta \lambda}$ es la fugacidad. El numerador y el denominador pueden ser diferenciados con respecto a la fugacidad,

$$\frac{\partial_\zeta \text{Tr} [e^{-\beta H} \zeta^Q A]}{\partial_\zeta \text{Tr} [e^{-\beta H} \zeta^Q]} = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} \zeta^Q A Q]}{\text{Tr} [e^{-\beta H} \zeta^Q Q]} = \frac{\langle A Q \rangle_G}{\langle Q \rangle_G}.$$

El valor de expectación del numerador es

$$Z_G \langle A Q \rangle_G = e^{-\beta \lambda} Z_1 \langle A \rangle_1 + 2e^{-\beta \lambda^2} Z_2 \langle A \rangle_2 + \dots,$$

donde $\langle \rangle_Q$ es el valor de expectación en el espacio con Q partículas. El denominador es

$$Z_G \langle Q \rangle_G = e^{-\beta \lambda} Z_1 + 2e^{-\beta \lambda^2} Z_2 + \dots,$$

por tanto

$$\frac{\langle A Q \rangle_G}{\langle Q \rangle_G} = \frac{Z_1 \langle A \rangle_1 + 2e^{-\beta \lambda} Z_2 \langle A \rangle_2 + \dots}{Z_1 + 2e^{-\beta \lambda} Z_2 + \dots},$$

y la proyección al espacio con $Q = 1$ se puede realizar haciendo $\lambda \rightarrow \infty$

$$\langle A \rangle = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{\langle A Q \rangle_G}{\langle Q \rangle_G}.$$

Esta expresión se puede simplificar aún más notando que el valor de expectación $\langle A \rangle_G$ es

$$Z_G \langle A \rangle_G = Z_0 \langle A \rangle_0 + e^{-\beta \lambda} Z_1 \langle A \rangle_1 + e^{-\beta \lambda^2} Z_2 \langle A \rangle_2 + \dots,$$

y para los operadores de interés $\langle A \rangle_0 = 0$. Por consiguiente,

$$\langle A \rangle = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{\langle A \rangle_G}{\langle Q \rangle_G},$$

y las propiedades físicas se pueden obtener tomando el límite $\lambda \rightarrow \infty$ en las expresiones calculadas en el ensamble gran canónico, con un número arbitrario de partículas. En particular,

$$G_{d\sigma}(\tau) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{G_{d\sigma}^\lambda(\tau)}{\langle Q \rangle_G}, \quad (\text{B.11})$$

es la expresión apropiada para la función de Green física. Depende de las funciones de Green para las partículas auxiliares. Para calcular el límite, se debe demostrar que el límite para estas funciones de Green y también el límite del denominador están bien definidos.

La representación Lehmann

Para investigar el efecto del límite es conveniente trabajar con la representación de la Lehmann introducida en la Sec. A.4. Para la partícula auxiliar a ,

$$G_a^\lambda(\tau) = -\langle T_\tau a(\tau) a^\dagger(0) \rangle_G,$$

que para $\tau > 0$ es

$$G_a^\lambda(\tau > 0) = -\frac{1}{Z_G} \text{Tr} [e^{-\beta K} e^{\tau K} a e^{-\tau K} a^\dagger],$$

con $Z_G = \text{Tr} [e^{-\beta K}]$. Introduciendo una base $\{|q\rangle\}$ de estados propios de K con un número arbitrario de partículas,

$$G_a^\lambda(\tau > 0) = \frac{-1}{Z_G} \sum_{q,q'} e^{-\beta \lambda Q_q} e^{\tau \lambda (Q_q - Q_{q'})} e^{-\beta E_q} e^{\tau (E_q - E_{q'})} \langle q|a|q' \rangle \langle q'|a^\dagger|q \rangle,$$

que en el dominio de la frecuencia resulta

$$G_a^\lambda(i\omega_n) = \frac{-1}{Z_G} \sum_{q,q'} e^{-\beta \lambda Q_q} e^{-\beta E_q} \frac{e^{[i\omega_n + \lambda(Q_q - Q_{q'}) + (E_q - E_{q'})]\beta} - 1}{i\omega_n + \lambda(Q_q - Q_{q'}) + E_q - E_{q'}} \langle q|a|q' \rangle \langle q'|a^\dagger|q \rangle.$$

Dado que $i\omega$ puede ser bosónica o fermiónica, $e^{\beta i\omega} = \pm 1$, con $+$ ($-$) para bosones (fermiones). Usando esto, la representación Lehmann de la función de Green es

$$G_a^\lambda(i\omega_n) = \frac{1}{Z_G} \sum_{q,q'} \frac{e^{-(\lambda Q_q + E_q)\beta} - (\pm) e^{-(\lambda Q_{q'} + E_{q'})\beta}}{i\omega_n + \lambda(Q_q - Q_{q'}) + E_q - E_{q'}} \langle q|a|q' \rangle \langle q'|a^\dagger|q \rangle.$$

El límite $\lambda \rightarrow \infty$ para las funciones de Green

Los estados $|q\rangle$ y $|q'\rangle$ en la representación de Lehmann no pueden diferir en más de una partícula, por lo tanto

$$G_a^\lambda(i\omega_n) = \frac{1}{Z_G} \sum_{q,q'} \frac{e^{-(\lambda Q_q + E_q)\beta} - (\pm)e^{-(\lambda Q_q + \lambda + E_{q'})\beta}}{i\omega_n - \lambda + E_q - E_{q'}} |\langle q|a|q'\rangle|^2 \delta(Q_{q'} - Q_q - 1).$$

Desplazando la escala de energía $i\omega_n + \lambda$, la única dependencia de λ está en el exponente,

$$G_a^\lambda(i\omega_n + \lambda) = \frac{1}{Z_G} \sum_{q,q'} \frac{e^{-(\lambda Q_q + E_q)\beta} - (\pm)e^{-(\lambda Q_q + \lambda + E_{q'})\beta}}{i\omega_n + E_q - E_{q'}} |\langle q|a|q'\rangle|^2 \delta(Q_{q'} - Q_q - 1),$$

y el límite es sencillo porque los términos que sobreviven son los que tienen $Q_q = 0$. Llamando $|\alpha\rangle$ y $|\alpha'\rangle$ a los estados con $Q_q = 0$ y $Q_q = 1$, respectivamente,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} G_a^\lambda(i\omega_n + \lambda) = \frac{1}{Z_0} \sum_{\alpha,\alpha'} e^{-\beta E_\alpha} \frac{1}{i\omega_n + E_\alpha - E_{\alpha'}} |\langle \alpha|a|\alpha'\rangle|^2,$$

donde fue utilizado también el hecho de que $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} Z_G = Z_0$. El límite existe y es finito. La función de Green proyectada se puede definir como

$$G_a(i\omega_n) \equiv \lim_{\lambda \rightarrow \infty} G_a^\lambda(i\omega_n + \lambda). \quad (\text{B.12})$$

Prolongación analítica y densidad de estados

Como se discutió en la Sec. A.4, la función de Green retardada puede ser recuperada de la función de Green de Matsubara mediante la sustitución de $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ con η un infinitesimal positivo, $G_a^r(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G_a(\omega + i\eta)$. A su vez, la densidad de estados puede obtenerse tomando la parte imaginaria de la función de Green retardada $\rho_a(\omega) = \frac{-1}{\pi} \text{Im} G_a^r(\omega)$, por lo que $\rho_a^\lambda(\omega)$ es la parte imaginaria de

$$\frac{1}{Z_G} \sum_{q,q'} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{e^{-(\lambda Q_q + E_q)\beta} - (\pm)e^{-(\lambda Q_q + \lambda + E_{q'})\beta}}{\omega + i\eta - \lambda + E_q - E_{q'}} |\langle q|a|q'\rangle|^2 \delta(Q_{q'} - Q_q - 1),$$

donde usando el teorema Sokhatsky-Weierstrass

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega + i\eta} = \wp \frac{1}{\omega} - i\pi \delta(\omega),$$

y el desplazando la frecuencia a $\omega + \lambda$, la densidad de estados $\rho_a^\lambda(\omega + \lambda) =$

$$\frac{1}{Z_G} \sum_{q,q'} (e^{-(\lambda Q_q + E_q)\beta} - (\pm)e^{-(\lambda Q_q + \lambda + E_{q'})\beta}) \delta(\omega + E_q - E_{q'}) |\langle q|a|q'\rangle|^2 \delta_{Q_{q'}, Q_q + 1}.$$

Tomando el límite $\lambda \rightarrow \infty$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \rho_a^\lambda(\omega + \lambda) = \frac{1}{Z_0} \sum_{\alpha, \alpha'} e^{-\beta E_\alpha} \delta(\omega + E_\alpha - E_{\alpha'}) |\langle \alpha | a | \alpha' \rangle|^2,$$

que se define como la densidad de estados proyectada

$$\rho_a(\omega) \equiv \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \rho_a^\lambda(\omega + \lambda). \quad (\text{B.13})$$

El límite para el operador Q

El valor de expectación del operador Q ,

$$\langle Q \rangle_G(\tau) = \langle b^\dagger(\tau) b(\tau) \rangle_G + \sum_\sigma \langle f_\sigma^\dagger(\tau) f_\sigma(\tau) \rangle_G,$$

se puede calcular teniendo en cuenta que las funciones de Green cuando $\tau = \tau'$ satisfacen

$$G_a^\lambda(0) = -\langle T_\tau(a(\tau) a^\dagger(\tau)) \rangle_G = \pm \langle a^\dagger(\tau) a(\tau) \rangle_G,$$

donde $+$ es para fermiones y $-$ para bosones. Por consiguiente,

$$\langle Q \rangle_G(\tau) = -G_b^\lambda(0) + \sum_\sigma G_\sigma^\lambda(0).$$

En lugar de calcular $G_a^\lambda(0)$, es conveniente determinar $G_a^\lambda(\eta)$ con $\eta \rightarrow 0$. Esta función de Green puede obtenerse anti-transformando desde el dominio de frecuencia,

$$G_a^\lambda(\eta) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \eta} G_a^\lambda(i\omega_n),$$

donde usando la representación espectral,

$$G_a^\lambda(\eta) = \int dx \rho_a^\lambda(x) \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n \eta}}{i\omega_n - x}.$$

Después de realizar la suma de Matsubara $S(x) = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n \eta}}{i\omega_n - x}$ y haciendo $\eta \rightarrow 0$,

$$G_a^\lambda(0) = \pm \int dx \rho_a^\lambda(x) g(x),$$

donde el signo es $+$ ($-$) y g_a es la función de distribución de Fermi (Bose) para fermiones (bosones). El valor de expectación del operador Q es, por lo tanto,

$$\langle Q \rangle_G = \int dx \left[\rho_b^\lambda(x) b(x) + \sum_\sigma \rho_\sigma^\lambda(x) f(x) \right].$$

A fin de tomar el límite de $\lambda \rightarrow \infty$, las energías se desplazan $x \rightarrow x + \lambda$,

$$\langle Q \rangle_G = e^{-\beta\lambda} \int dx \left[\frac{\rho_b^\lambda(x + \lambda)}{e^{\beta x} - e^{-\beta\lambda}} + \sum_\sigma \frac{\rho_\sigma^\lambda(x + \lambda)}{e^{\beta x} + e^{-\beta\lambda}} \right],$$

y usando el resultado de la Ec. (B.13)

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} \langle Q \rangle_G = \int dx e^{-\beta x} \left[\rho_b(x) + \sum_\sigma \rho_\sigma(x) \right], \quad (\text{B.14})$$

que es la función de partición Z_1 .

El límite para el propagador físico

A fin de obtener la función de Green física proyectada es conveniente escribir la Ec. (B.11) como

$$G_d(i\omega_n) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{e^{\beta\lambda}}{e^{\beta\lambda}} \frac{G_d^\lambda(i\omega_n)}{\langle Q \rangle_G},$$

donde a partir de la Ec. (B.10)

$$G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) = \int dx [\rho_b^\lambda(x) b(x) G_\sigma^\lambda(x + i\omega_n) - f(x) \rho_\sigma^\lambda(x) G_b^\lambda(x - i\omega_n)].$$

Multiplicando por $e^{\beta\lambda}$ y cambiando $x \rightarrow x + \lambda$,

$$\begin{aligned} e^{\beta\lambda} G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) &= \int dx \left[\frac{1}{e^{\beta x} - e^{-\beta\lambda}} \rho_b^\lambda(x + \lambda) G_\sigma^\lambda(x + \lambda + i\omega_n) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{e^{\beta x} + e^{-\beta\lambda}} \rho_\sigma^\lambda(x + \lambda) G_b^\lambda(x + \lambda - i\omega_n) \right], \end{aligned}$$

Así, utilizando los resultados de la Ec. (B.12) y la Ec. (B.13), el límite de $\lambda \rightarrow \infty$ da

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{\beta\lambda} G_{d\sigma}^\lambda(i\omega_n) = \int dx e^{-\beta x} [\rho_b(x) G_\sigma(x + i\omega_n) - \rho_\sigma(x) G_b(x - i\omega_n)],$$

y finalmente, combinando con la Ec. (B.14)

$$\boxed{G_d(i\omega_n) = \frac{1}{Z_1} \int dx e^{-\beta x} [\rho_b(x) G_\sigma(x + i\omega_n) - \rho_\sigma(x) G_b(x - i\omega_n)]}. \quad (\text{B.15})$$

La densidad de estados física

Recuperando la función de Green retardada de la Ec. (B.15),

$$G_d^r(\omega) = \frac{1}{Z_1} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int dx e^{-\beta x} [\rho_b(x) G_\sigma^r(x + \omega + i\eta) - \rho_\sigma(x) G_b^r(x - \omega - i\eta)],$$

y tomando la parte imaginaria,

$$G_d^{\mathbb{I}}(\omega) = \frac{-\pi}{Z_1} \int dx e^{-\beta x} [\rho_b(x) \rho_\sigma(x + \omega) - \rho_\sigma(x) \rho_b(x - \omega)], \quad (\text{B.16})$$

y

$$\boxed{\rho_d(\omega) = \frac{1}{Z_1} \int dx e^{-\beta x} [\rho_b(x) \rho_\sigma(x + \omega) - \rho_\sigma(x) \rho_b(x - \omega)]}. \quad (\text{B.17})$$

NCA fuera de equilibrio

En este apéndice se presentan los detalles relativos a la extensión de la aproximación *non-crossing* para tratar los problemas de no equilibrio. Como se discute en la Sec. A.5 del **Apéndice A** la NCA es una aproximación concebida para resolver el modelo de Anderson para el problema de la impureza. Sin embargo, como fue señalado por Meir y Wingreen [Meir and Wingreen, 1992], en algunos casos, el transporte a través de una región con interacciones puede ser modelado usando el modelo de Anderson. Esto es razonable ya que en los dispositivos nanoscópicos es posible tener regiones en las que los electrones están muy confinados y se comportan como átomos artificiales, con niveles localizados y un espectro discreto de energía. Si las regiones son lo suficientemente pequeñas, los niveles son muy localizados y la repulsión de Coulomb es relevante. En un cierto régimen, un electrón ocupando el nivel localizado con espín hacia arriba o hacia abajo desempeña el papel de una única “impureza”. Como en un metal, la impureza se hibrida con los electrones de conducción de la fuente y el sumidero conectados a la región confinada pudiendo ocupar los estados localizados. A su vez, un electrón localizado puede saltar de nuevo a los cables. La NCA es una herramienta muy útil, ya que puede ser extendida para resolver el modelo Anderson fuera de equilibrio [Wingreen and Meir, 1994].

C.1. Modelo

En el modelo para el problema de transporte, el sistema se divide en

$$H = H_L + H_R + H_C + H_{MIX},$$

donde H_ν es el Hamiltoniano del reservorio a izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$), que se puede describir como un metal

$$H_\nu = \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger c_{k\nu\sigma},$$

con diferentes potenciales químicos μ_ν , por lo que $\epsilon_{k,\nu,\sigma} = \epsilon_{k,\sigma} - \mu_\nu$. H_C es el Hamiltoniano del conductor central. Se describe como un conjunto de niveles discretos de energía, que es el caso para los sistemas electrónicos confinados tales como puntos cuánticos en semiconductores y moléculas.

La repulsión de Coulomb U mide el costo de la energía para poner dos electrones en el mismo nivel localizado. En el caso particular de un solo nivel de energía E_d degenerado en espín

$$H_C = \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow}.$$

Por último, H_{MIX} es Hamiltoniano para la mezcla entre los electrones de conducción y los electrones localizados. Describe los procesos en los que los electrones entran en o salen del conductor central desde o hacia los cables

$$H_{MIX} = \sum_{k\nu\sigma} \left(V_{k\nu\sigma} c_{k\nu\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + H.c. \right).$$

El Hamiltoniano completo es

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k,\nu,\sigma} \epsilon_{k,\nu,\sigma} c_{k\nu\sigma}^{\dagger} c_{k\nu\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \\ & + \sum_{k\nu\sigma} \left(V_{k\nu\sigma} c_{k\nu\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + H.c. \right), \end{aligned} \quad (C.1)$$

que recuerda al modelo de la impureza de Anderson. De hecho, dado que los electrones localizados se acoplan sólo con una combinación lineal de los estados de conducción, el modelo es un modelo de Anderson SU(2).

Las propiedades de transporte se pueden calcular con la expresión general para la corriente derivada por Meir y Wingreen [Meir and Wingreen, 1992]

$$\begin{aligned} I = & \frac{ie}{2h} \int d\omega \left[tr \left\{ (\Gamma^L f_L(\omega) - \Gamma^R f_R(\omega)) (G^r(\omega) - G^a(\omega)) \right\} \right. \\ & \left. + tr \left\{ (\Gamma^L - \Gamma^R) G^<(\omega) \right\} \right], \end{aligned}$$

donde f_L (f_R) es la función de distribución de Fermi del reservorio izquierdo (derecho), Γ^{ν} es la matriz de hibridación, $\Gamma_{\nu}(\omega) = 2\pi \sum_k V_{k\nu\sigma} V_{k\nu\sigma}^* \delta(\omega - \epsilon_{k\nu})$ y $G^{r,a,<}$ son las funciones de Green retardada, avanzada y menor. Ellas están determinadas por las propiedades del conductor central. En el contexto del Hamiltoniano de la Ec. (C.1), estas funciones de Green son el resultado de resolver el problema interactuante en presencia de los cables con diferentes potenciales químicos.

Antes de exponer los detalles, como se discutió en la Sec. A.6 hay relaciones útiles entre los propagadores. Utilizando el resultado de la Ec. (A.45), $G^r - G^a = G^> - G^<$, la corriente puede calcularse sólo en términos de las funciones de Green menor y mayor.

C.2. Representación en términos de partículas auxiliares

Con el fin de resolver el Hamiltoniano de la Ec. (C.1), las posibles ocupaciones del nivel de energía $\{|0\rangle, |\sigma\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ están representadas por nuevas partículas llamadas **partículas auxiliares**. En el límite de repulsión de

Coulomb infinita la doble ocupación está prohibida. La relación de completitud es

$$|0\rangle\langle 0| + \sum_{\sigma} |\sigma\rangle\langle \sigma| = 1,$$

y las partículas auxiliares se introducen con la identificación

$$\begin{cases} |0\rangle \rightarrow b^\dagger |vac\rangle \\ |\sigma\rangle \rightarrow f_\sigma^\dagger |vac\rangle \end{cases}$$

donde f_σ^\dagger es el operador de la creación de un **pseudo-fermión** (para diferenciarlo de los verdaderos fermiones) y b^\dagger representa al **bosón vacío o esclavo**. La relación de completitud se puede asegurar introduciendo el operador

$$Q = b^\dagger b + \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma,$$

e imponiendo la restricción $Q = 1$. El fermión físico $d_\sigma^\dagger = |\sigma\rangle\langle 0|$ se puede escribir en términos de partículas auxiliares como $d_\sigma^\dagger = f_\sigma^\dagger b$. La ocupación del nivel localizado implica la destrucción del bosón vacío acompañado con la creación de un pseudo-fermión.

El Hamiltoniano puede ser también escrito en la representación de partículas auxiliares. Introduciendo el vínculo con un multiplicador de Lagrange λ como $K = H + \lambda Q$, el Hamiltoniano se puede separar como $K = K_0 + K_1$ con

$$\begin{aligned} K_0 &= H_L + H_R + \sum_{\sigma} (E_d + \lambda) f_\sigma^\dagger f_\sigma + \lambda b^\dagger b, \\ K_1 &= \sum_{k\nu\sigma} \left(V_{k\nu\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger b^\dagger f_\sigma + H.c. \right). \end{aligned} \quad (C.2)$$

Cabe señalar que la repulsión de Coulomb parece haberse perdido. De hecho, la restricción al espacio de $Q = 1$ garantiza el efecto de la repulsión infinita: sólo hay una partícula auxiliar (vacío o pseudo-fermión) a cada momento en el nivel.

C.3. El propagador físico en la representación de partículas auxiliares

A partir de las definiciones dadas en las Ecs. (A.43) y (A.44), las funciones de Green menor y mayor para el fermión físico son

$$G_{d,\sigma}^<(t-t') = i\langle d_\sigma^\dagger(t') d_\sigma(t) \rangle, \quad (C.3)$$

$$G_{d,\sigma}^>(t-t') = -i\langle d_\sigma(t) d_\sigma^\dagger(t') \rangle, \quad (C.4)$$

y las funciones de Green retardadas y avanzadas son

$$G_{d,\sigma}^r(t-t') = -i\theta(t-t')\langle \{d_\sigma(t), d_\sigma^\dagger(t')\} \rangle, \quad (C.5)$$

$$G_{d,\sigma}^a(t-t') = i\theta(t',t)\langle \{d_\sigma(t), d_\sigma^\dagger(t')\} \rangle. \quad (C.6)$$

Se ha considerado que en el régimen estacionario estos propagadores dependen sólo de la diferencia de los tiempos, $t - t'$. Estas funciones pueden escribirse en términos de las partículas auxiliares. A partir de la definición del propagador menor (Ec. (C.3))

$$G_{d,\sigma}^<(t - t') = i\langle f_{\sigma}^{\dagger}(t')b(t')b^{\dagger}(t)f_{\sigma}(t) \rangle,$$

que como se discutió en el **Apéndice B** dentro de la NCA se factoriza como un producto de los valores de expectación para cada partícula auxiliar,

$$G_{d,\sigma}^<(t - t') \stackrel{NCA}{=} i\langle f_{\sigma}^{\dagger}(t')f_{\sigma}(t) \rangle \langle b(t')b^{\dagger}(t) \rangle.$$

Introduciendo las funciones de Green menores y mayores para el pseudofermión y el bosón dvació,

$$G_{\sigma}^<(t - t') = i\langle f_{\sigma}^{\dagger}(t')f_{\sigma}(t) \rangle, \quad (C.7)$$

$$G_{\sigma}^>(t - t') = -i\langle f_{\sigma}(t)f_{\sigma}^{\dagger}(t') \rangle, \quad (C.8)$$

$$D^<(t - t') = -i\langle b^{\dagger}(t')b(t) \rangle, \quad (C.9)$$

$$D^>(t - t') = -i\langle b(t)b^{\dagger}(t') \rangle, \quad (C.10)$$

los propagadores físicos dentro de la NCA pueden calcularse como

$$G_{d,\sigma}^<(t - t') \stackrel{NCA}{=} iG_{\sigma}^<(t - t')D^>(t' - t), \quad (C.11)$$

$$G_{\sigma}^>(t - t') \stackrel{NCA}{=} iD^<(t' - t)G_{\sigma}^>(t - t'). \quad (C.12)$$

En el dominio de frecuencia,

$$G_{d,\sigma}^<(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_{\sigma}^<(\omega' + \omega)D^>(\omega'), \quad (C.13)$$

$$G_{d,\sigma}^>(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_{\sigma}^>(\omega' + \omega)D^<(\omega'). \quad (C.14)$$

Con el fin de resolver el problema fuera de equilibrio y calcular las propiedades de transporte, es necesario encontrar las funciones de Green físicas menores y mayores definidas en las Ecs. (C.3) y (C.4). Ellas pueden ser obtenidos a partir de las de las partículas auxiliares a través de las Ecs. (C.13) y (C.14). El problema es ahora calcular cuatro propagadores en lugar de dos: $G_{\sigma}^>, G_{\sigma}^<, D^>$ y $D^<$.

C.4. Expansión diagramática NCA

Los bloques de construcción

Las funciones de Green para las partículas auxiliares definidas en las Ecs. (C.7) - (C.10) se pueden calcular en un desarrollo perturbativo. El acoplamiento entre los electrones de conducción y el conductor central descripto

por K_1 (Eq. (C.2)) se trata como una perturbación. Teniendo en cuenta el resultado de la Ec. (A.48), la función de Green menor para el pseudo-fermión puede calcularse como

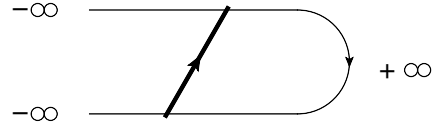
$$G_{\sigma}^{<}(t-t') = i \sum_n (-i)^n \int ds_1 \cdots \int ds_n \langle T_C \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(t') \hat{K}_1(s_1) \cdots \hat{K}_1(s_n) \hat{f}_{\sigma}(t) \rangle_0,$$

donde $s_1 \cdots s_n$ son variables de tiempo que viven en el contorno de Keldysh, T_C es el operador de ordenamiento temporal en el contorno y sólo los diagramas conectados y topológicamente diferentes son considerados. La notación sombrero se utiliza para los operadores en la representación de interacción. El orden cero da la **función de Green menor no perturbada**

$$g_{\sigma}^{<}(t-t') = i \langle \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(t') \hat{f}_{\sigma}(t) \rangle_0,$$

representada como una flecha de línea continua en la Fig. C.1. En la función de Green menor está implícito que la creación se produce después de la destrucción. La flecha va desde la parte inferior hacia la rama superior del contorno Keldysh.

Figura C.1: Propagador menor desnudo para el pseudo-fermión.



Los otros propagadores no perturbados son

$$\begin{aligned} g_{\sigma}^{>}(t-t') &= -i \langle \hat{f}_{\sigma}(t) \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(t') \rangle_0 \\ d^{<}(t-t') &= -i \langle \hat{b}^{\dagger}(t') \hat{b}(t) \rangle_0, \\ d^{>}(t-t') &= -i \langle \hat{b}(t) \hat{b}^{\dagger}(t') \rangle_0, \end{aligned}$$

los cuales están representados en la Fig. C.2.

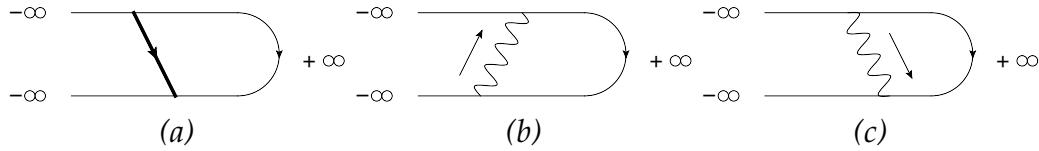
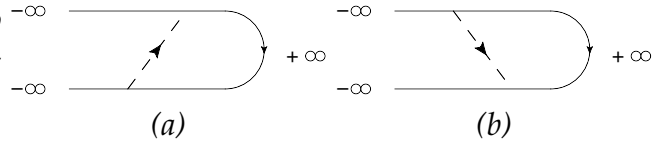


Figura C.2: Propagador mayor desnudo para (a) el pseudo-fermión y (c) el bosón. (b) Propagador desnudo menor para el bosón.

Para los propagadores mayores, la destrucción se produce después de la creación. La dirección es desde la rama superior hacia la rama inferior. El propagador para el bosón se representa con una línea ondulada. Las otras funciones de Green importantes son las de los electrones de conducción

$$\begin{aligned} g_{k\nu\sigma}^{<}(t-t') &= i \langle \hat{c}_{k\nu\sigma}^{\dagger}(t') \hat{c}_{k\nu\sigma}(t) \rangle_0, \\ g_{k\nu\sigma}^{>}(t-t') &= -i \langle \hat{c}_{k\nu\sigma}(t) \hat{c}_{k\nu\sigma}^{\dagger}(t') \rangle_0, \end{aligned}$$

Figura C.3: Propagador desnudo $^{-\infty}$ (a) menor y (b) mayor para los electrones de conducción.

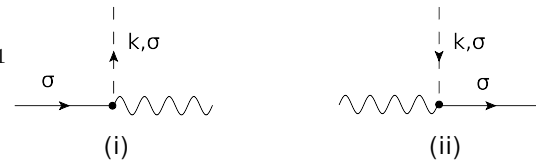


las cuales están representados en la Fig. C.3 con flechas de líneas de trazos.

Los propagadores desnudos representados en las Fig. C.1, C.2 y C.3 son los bloques de construcción para la serie diagramática.

El vínculo entre estos bloques está dado por los vértices de la teoría. Dado K_1 , estos son (i) $V_{k\nu\sigma} c_{k\nu\sigma}^\dagger b^\dagger f_\sigma$ y (ii) $V_{k\nu\sigma}^* f_\sigma^\dagger b c_{k\nu\sigma}$. Están representados en la Fig. C.4.

Figura C.4: Vértices de la perturbación K_1 descritos en el texto.



El vértice (i) representa un electrón que deja el nivel localizado destruyendo un pseudo-fermión y creando un bosón vacío junto con la creación de un electrón de conducción en el cable. (ii) Describe lo contrario, un electrón que se destruyó en el cable y creado en el conductor, junto con la destrucción del bosón vacío.

Desarrollo diagramático a segundo orden y más

El próximo orden no trivial en perturbaciones es $n = 2$. Hay dos vértices que pueden estar en la parte superior o en la rama inferior del contorno. Esto significa que hay $2^2 = 4$ posibilidades para los vértices. El desarrollo diagramático hasta segundo orden para la función de Green menor del pseudo-fermión se muestra en la Fig. C.5.

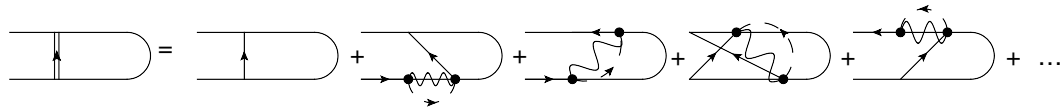


Figura C.5: Desarrollo diagramático a segundo orden para la función de Green menor del pseudo-fermión.

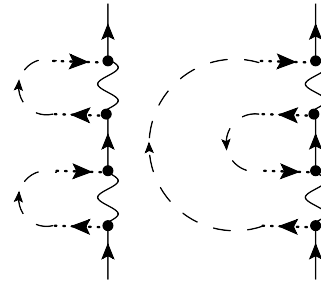
el desarrollo diagramático es similar al caso en equilibrio explicado en la Sec. A.5. El problema es ahora que todos los posibles diagramas pueden ahora estar en la parte superior o en la rama inferior del contorno, ¡o compartido por ambos!. La estructura es como

$$G^<(\omega) = g^<(\omega) + g^<(\omega)\Sigma^T(\omega)G^T(\omega) + g^{\tilde{T}}(\omega)\Sigma^<(\omega)G^T(\omega) \\ + g^<(\omega)\Sigma^>(\omega)G^<(\omega) + g^{\tilde{T}}(\omega)\Sigma^{\tilde{T}}(\omega)G^<(\omega),$$

donde Σ es la auto-energía. En este caso se trata de una “burbuja” formada por el propagador del bosón y el de los electrones de conducción. Si esta auto-energía es sustituida por la **auto-energía irreducible**, que es la suma sobre todas las diferentes contribuciones de auto-energía, el resultado permite llegar a la ecuación de Dyson de no equilibrio. Se puede demostrar que dentro de la NCA, donde no se tienen en cuenta todos los diagramas con cruces de propagadores de electrones de conducción, es posible hacer esta resumación.

Con el fin de ilustrar cómo se puede hacer esto, el desarrollo se continúa hasta $n = 4$. Hay cuatro vértices y, por tanto, $2^4 = 16$ posibles posiciones en el contorno. Por otra parte, hay dos diagramas topológicamente diferentes que pueden ser contruidos de acuerdo con las posibles contracciones compatibles con el teorema de Wick. Estos dos diagramas se muestran en la Fig. C.6.

Figura C.6: Posibles diagramas conectados que se pueden construir con cuatro vértices.



El primer diagrama es **reducible** ya que se puede cortar con una línea vertical sin necesidad de partir un propagador al medio y el segundo es **irreducible**. La contribución del orden $n = 4$ se puede separar como contribuciones a Σ^T , $\Sigma^<$, $\Sigma^>$ y $\Sigma^{\tilde{T}}$. La forma general de los desarrollos perturbativos en el formalismo Keldysh fue discutido en la Sec. A.6 del **Apéndice A**.

- (- -) Las contribuciones de $n = 4$ a la auto-energía anti-ordenada temporal $\Sigma^{\tilde{T}}$ (o Σ^{--}) se muestran en la Fig. C.7

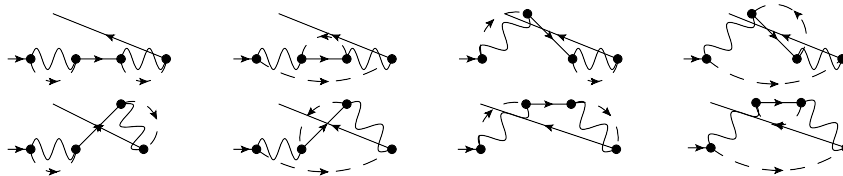


Figura C.7: Contribuciones de $n = 4$ a $\Sigma^{\tilde{T}}$.

- (- +) Las contribuciones de $n = 4$ a la auto-energía menor $\Sigma^<$ (o Σ^{-+}) se muestran en la Fig. C.8
- (+ -) La contribución de $n = 4$ para la auto-energía mayor $\Sigma^>$ (o Σ^{+-}) se muestran en la Fig. C.9

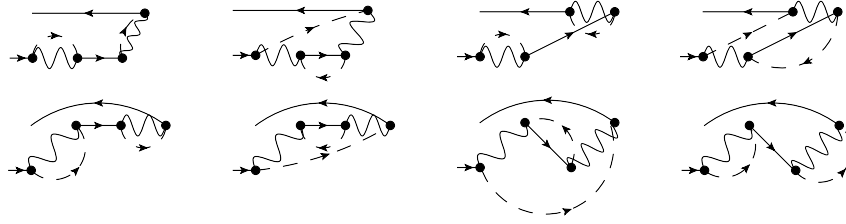


Figura C.8: Contribuciones de $n = 4$ a $\Sigma^<$.

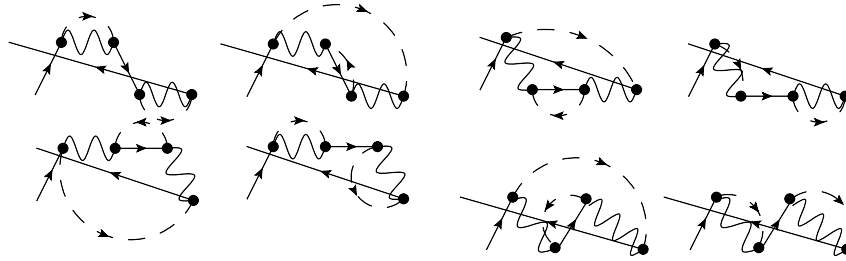


Figura C.9: Contributions of $n = 4$ to $\Sigma^>$.

(+ +) Por último, las contribuciones de $n = 4$ a la auto-energía ordenada temporal Σ^T (o Σ^{++}) se muestran en la Fig. C.10

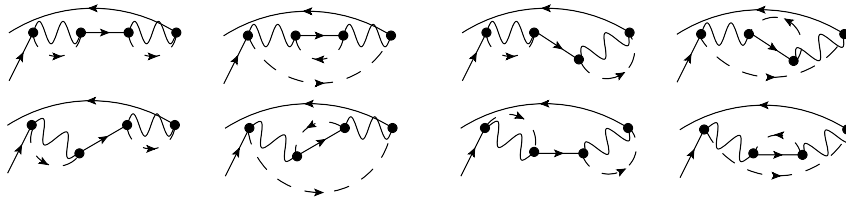


Figura C.10: Contribuciones de $n = 4$ a Σ^T .

Hay 32 nuevos diagramas además a los cuatro anteriores y los propagadores desnudos. En cada una de estas expansiones las contribuciones reducibles e irreducibles se pueden separar. Los términos irreducibles se pueden poner todos juntos y factorizar apropiadamente como se muestra en la Fig. C.11 para las contribuciones a la auto-energía menor.

La expresión entre paréntesis es propagador menor vestido del bosón. Esta es la resumación de la NCA. Es posible porque los diagramas con cruces no se tienen en cuenta (lo que permite tomar el propagador del electrón de conducción como un factor común). En la auto-energía irreducible menor que se muestra en la Fig. C.12 todos los diagramas irreducibles a todos los órdenes de perturbaciones son considerados. Las auto-energías irreducibles ordenada temporal, mayor y anti-ordenada se pueden encontrar de forma análoga.

Las burbujas de auto-energía irreducibles se pueden insertar en los diagramas reducibles. La serie diagramática resultante para la función de Green menor del pseudo-fermión se muestra en la Fig. C.13.

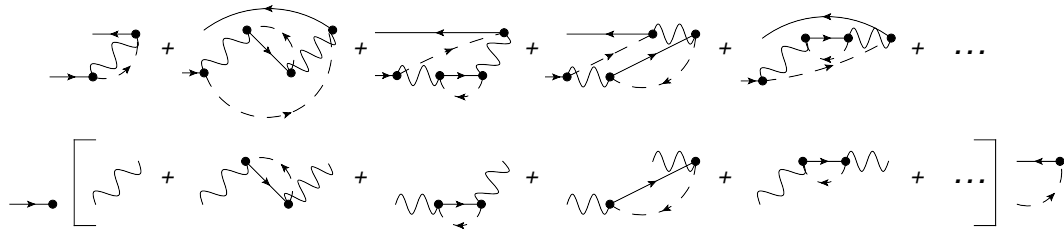


Figura C.11: Factorización de los diagramas irreducibles que contribuyen a la auto-energía menor.

Figura C.12: Corrección de la función de Green menor con la auto-energía irreducible.

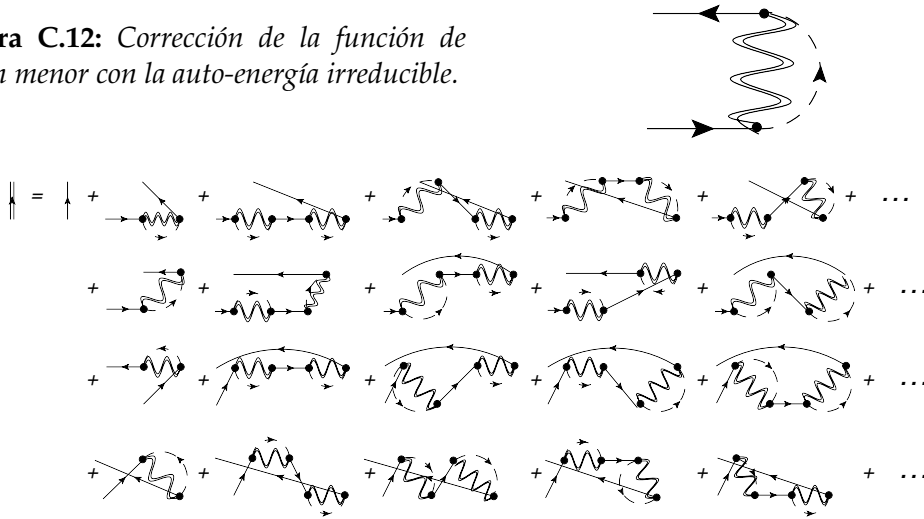


Figura C.13: Desarrollo diagramático de la función de Green menor del pseudo-fermión. Todas las burbujas de auto-energía en los diagramas reducibles han sido sustituidas por las correspondientes auto-energías irreducibles.

Con la factorización apropiada, esta expansión se puede simplificar y mostrar que toma la forma de una **ecuación de Dyson de no equilibrio**. El conjunto de ecuaciones NCA de no equilibrio se presenta en la Fig. C.14.

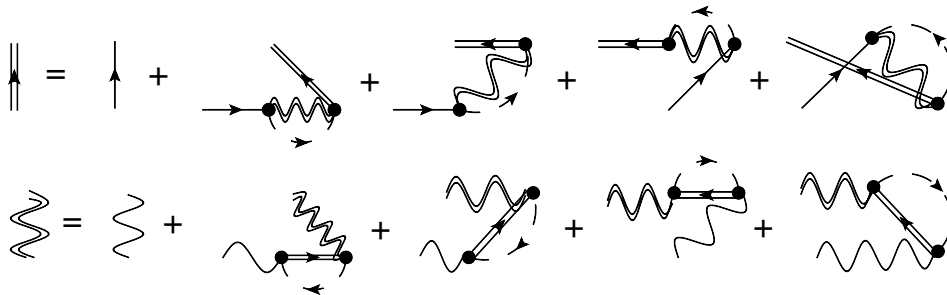


Figura C.14: Ecuaciones de Dyson NCA de no equilibrio.

Los resultados para las funciones de Green menores del pseudo-fermión y el bosón se muestran juntas en la figura, ya que forman el núcleo de la

aproximación. Estas ecuaciones tienen que ser resueltas auto-consistentemente. La NCA es una aproximación no perturbativa, ya que tiene en cuenta infinitos órdenes en perturbaciones.

C.5. Expresiones analíticas

Se puede observar que las funciones de Green menores dependen de las cuatro auto-energías (ordenada temporal, menor, mayor y anti-ordenada) que a su vez, dependen de las cuatro funciones de Green vestidas. El problema parece bastante complicado. Esta es la estructura de la ecuación de Dyson en el formalismo Keldysh. Sin embargo, como se muestra en la Sec. A.8, la componente menor de la ecuación de Dyson se puede calcular como (véase la Ec. (A.58))

$$\begin{aligned} G^{\lessgtr} &= G^r \Sigma^{\lessgtr} G^a, \\ D^{\lessgtr} &= D^r \Pi^{\lessgtr} D^a, \end{aligned}$$

por lo tanto, sólo es necesario calcular las auto-energías menores y mayores. Las funciones de Green retardadas y avanzadas satisfacen ecuaciones de Dyson estándar

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{r,a}(\omega) &= \frac{1}{\omega - E_d - \Sigma_{\sigma}^{r,a}(\omega)}, \\ D^{r,a}(\omega) &= \frac{1}{\omega - E_0 - \Pi^{r,a}(\omega)}, \end{aligned}$$

y como se muestra a continuación, las auto-energías retardadas y avanzadas se pueden obtener de la menor y la mayor.

Auto-energía menor del pseudo-fermión

La auto-energía menor para el pseudo-fermión se muestra en la Fig. C.15.

Figura C.15: Auto-energía menor para el pseudo-fermión.



Con el fin de derivar la expresión analítica para la auto-energía, es más fácil escribir la expresión para el diagrama obtenido a segundo orden y luego cambiar al propagador desnudo del bosón por el vestido.

La función de Green menor del pseudo-fermión a segundo orden es

$$G_{\sigma}^{<(2)}(t - t') = i(-i)^2 \int ds_1 \int ds_2 \langle T_C \hat{f}_{\sigma}^{\dagger}(t') \hat{K}_1(s_1) \hat{K}_1(s_2) \hat{f}_{\sigma}(t) \rangle_0,$$

y escribiendo explícitamente la perturbación K_1

$$G_\sigma^{<(2)}(t) = i(-i)^2 \sum_{k, k', \nu, \sigma} |V_\nu|^2 \int ds_1 \int ds_2 \langle T_C \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \hat{c}_{k\nu\sigma}^\dagger(s_1) \hat{b}^\dagger(s_1) \hat{f}_\sigma(s_1) \\ \times \hat{f}_\sigma^\dagger(s_2) \hat{b}(s_2) \hat{c}_{k'\nu\sigma}(s_2) \hat{f}_\sigma(t) \rangle_0.$$

Para la auto-energía menor, $s_1 \in C_2$ (la rama inferior) y $s_2 \in C_1$. Las integrales de contorno convierten en integrales en tiempo real

$$G_\sigma^{<(2)}(t) \stackrel{''}{=} i(-i)^2 \sum_{\nu\sigma k k'} |V_\nu|^2 \int_{+\infty}^{-\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \langle T_C \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \hat{c}_{k\nu\sigma}^\dagger(t_1) \hat{b}^\dagger(t_1) \hat{f}_\sigma(t_1) \\ \times \hat{f}_\sigma^\dagger(t_2) \hat{b}(t_2) \hat{c}_{k'\nu\sigma}(t_2) \hat{f}_\sigma(t) \rangle_0,$$

y de acuerdo con el teorema de Wick, sólo hay una posible contracción que lleva a un diagrama conectado

$$G_\sigma^{<(2)}(t) \stackrel{''}{=} -i(-i)^2 \sum_{\nu\sigma k k'} |V_\nu|^2 \int dt_1 \int dt_2 \langle \hat{c}_{k\nu\sigma}^\dagger(t_1) \hat{c}_{k'\nu\sigma}(t_2) \rangle_0 \langle \hat{b}^\dagger(t_1) \hat{b}(t_2) \rangle_0 \\ \langle \tilde{T} \hat{f}_\sigma(t_1) \hat{f}_\sigma^\dagger(0) \rangle_0 \langle T \hat{f}_\sigma(t) \hat{f}_\sigma^\dagger(t_2) \rangle_0.$$

Esto se puede escribir en términos de los propagadores no perturbados

$$G_\sigma^{<(2)}(t) \stackrel{''}{=} -i \sum_{\nu\sigma k k'} |V_\nu|^2 \int dt_1 \int dt_2 g_\sigma^T(t-t_2) g_{kk',\nu\sigma}^<(t_2-t_1) d^<(t_2-t_1) g_\sigma^{\tilde{T}}(t_1),$$

y dado que $g_{kk',\nu\sigma}^< = g_{k\nu\sigma}^< \delta_{k,k'}$,

$$G_\sigma^{<(2)}(t) \stackrel{''}{=} -i \sum_{\nu\sigma k} |V_\nu|^2 \int dt_1 \int dt_2 g_\sigma^T(t-t_2) g_{k\nu\sigma}^<(t_2-t_1) d^<(t_2-t_1) g_\sigma^{\tilde{T}}(t_1).$$

Así, a segundo orden

$$G_\sigma^{<(2)}(t) \stackrel{''}{=} - \int dt_1 \int dt_2 g_\sigma^T(t-t_2) \Sigma^{<(2)}(t_2-t_1) g_\sigma^{\tilde{T}}(t_1).$$

con la auto-energía

$$\Sigma_\sigma^{<(2)}(t_2-t_1) = i \sum_{k\nu} |V_\nu|^2 g_{k\nu\sigma}^<(t_2-t_1) d^<(t_2-t_1),$$

que es la traducción del diagrama de auto-energía burbuja. El diagrama irreducible puede obtenerse reemplazando el propagador no perturbado del bosón por el vestido

$$\Sigma_\sigma^{<}(t_2-t_1) \stackrel{NCA}{=} i \sum_{k\nu} |V_\nu|^2 g_{k\nu\sigma}^<(t_2-t_1) D^<(t_2-t_1).$$

En el dominio de frecuencia,

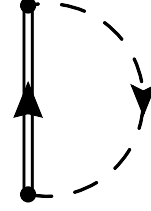
$$\boxed{\Sigma_\sigma^{<}(\omega) = i \sum_{k\nu} |V_\nu|^2 \int \frac{d\omega'}{2\pi} g_{k\nu\sigma}^<(\omega-\omega') D^<(\omega')}. \quad (C.15)$$

La auto-energía mayor puede obtenerse cambiando $<\rightarrow>$.

Auto-energía del bosón

El diagrama de la auto-energía del bosón se muestra en la Fig. C.16.

Figura C.16: Auto-energía menor del bosón.



La expresión analítica se puede encontrar de forma análoga,

$$\Pi^<(t_1 - t_2) \stackrel{NCA}{=} -i \sum_{k\nu\sigma} |V_\nu|^2 g_{kk,\nu\sigma}^>(t_1 - t_2) G_\sigma^<(t_2 - t_1),$$

y la transformada de Fourier

$$\boxed{\Pi^<(\omega) = -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{k\nu\sigma} |V_\nu|^2 g_{kk,\nu\sigma}^>(\omega' - \omega) G_\sigma^<(\omega')}. \quad (\text{C.16})$$

C.6. Funciones de Green retardadas y avanzadas

Las funciones de Green retardadas y avanzadas se pueden obtener de la menor y la mayor con la ayuda de las relaciones entre los propagadores

$$\begin{aligned} G^r(t) &= -\theta(t)(G^<(t) - G^>(t)), \\ G^a(t) &= -\theta(-t)(G^>(t) - G^<(t)). \end{aligned}$$

La contribución más importante proviene de las funciones de Green mayores ya que para la menor actúa primero el operador de destrucción en el estado fundamental. Por ende

$$\begin{aligned} G^r(t) &= +\theta(t)G^>(t), \\ G^a(t) &= -\theta(-t)G^>(t), \end{aligned}$$

que puede ser transformada al dominio de frecuencia

$$G^r(\omega) = \int dt \theta(t) G^>(t) e^{i\omega t}.$$

Usando la representación espectral de la función de Heaviside, $\theta(t) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \theta(\omega') e^{-i\omega' t}$, donde $\theta(\omega') = \frac{1}{\omega' + i\eta}$ con $\eta \rightarrow 0^+$,

$$G^r(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{G^>(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}, \quad (\text{C.17})$$

y para las avanzadas ¹

$$G^a(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{G^>(\omega')}{\omega - \omega' - i\eta}. \quad (\text{C.18})$$

Puede verificarse que $G^a(\omega + i\eta) = G^r(\omega - i\eta)$

Análogamente, para el bosón

$$D^r(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{D^>(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}, \quad (\text{C.19})$$

y para las auto-energías

$$\Sigma_\sigma^r(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Sigma_\sigma^>(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}, \quad (\text{C.20})$$

$$\Pi^r(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\pi^>(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta}. \quad (\text{C.21})$$

¹Aquí se ha utiliza $\theta(t) = -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \theta(\omega') e^{-i\omega' t}$, donde $\theta(\omega') = \frac{1}{\omega' - i\eta}$ con $\eta \rightarrow 0^+$

Detalles del cálculo de la espectroscopía del Kondo orbital

Este apéndice es un complemento de los **Capítulos 9 y 10**. Hemos modelado el transporte a través de un sistema de dos puntos cuánticos con un modelo de Anderson $SU(4)$. Dado que cada uno de los puntos está conectado a su propio par de cables de fuente y sumidero, hemos modificado nuestro esquema de cálculo para permitir cuatro potenciales químicos diferentes. Resolvemos el modelo con la extensión de la aproximación *non-crossing* (NCA) fuera de equilibrio. Las ecuaciones diagramáticas de la NCA en equilibrio se derivan en la Sec. A.5 del **Apéndice A**. Corresponden al modelo de Anderson $SU(2)$, es decir, sólo se considera un nivel con degeneración de espín. Trabajamos en un límite de repulsión de Coulomb muy grande (infinita) en el que se prohíbe la doble ocupación. Las ecuaciones NCA tienen que ser resueltas auto-consistentemente. Los detalles de la aproximación se discuten en el **Apéndice B**. Aunque la NCA no es la técnica numérica más robusta para resolver el problema de la impureza (en comparación con el grupo de renormalización numérico (NRG), por ejemplo), una de las ventajas de la NCA es que puede extenderse muy fácilmente fuera de equilibrio. Dado que es una aproximación diagramática, es posible obtener el conjunto de ecuaciones de NCA fuera de equilibrio utilizando el formalismo de Keldysh. Es como una traducción de los diagramas de equilibrio al contorno de Keldysh. Esto se discute en el **Apéndice C**. Tomando esto como punto de partida, presento en la Sec. D.1 las modificaciones necesarias en el problema de los dos puntos cuánticos. Además, en la Sec. D.2 se da una prueba de la conservación de la corriente dentro de la NCA.

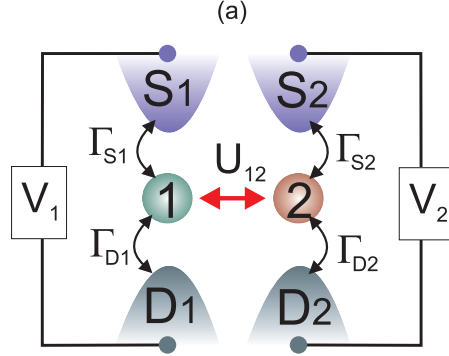
D.1. Cálculo numérico dentro la aproximación *non-crossing*

Modelo

Un esquema del sistema de dos puntos cuánticos se muestra en la Fig. D.1.

Nuestro modelo para este problema de dos puntos cuánticos (QD) cerca de la simetría $SU(4)$ considera una configuración singlete mezclada con dos

Figura D.1: Esquema del sistema de dos puntos cuánticos (DQD).



dobletes de espín $|i\sigma\rangle$ correspondientes a un electrón adicional (o hueco) en el QD i . El Hamiltoniano para nuestro modelo se puede separar como $H = H_L + H_R + H_C + H_{MIX}$, donde

$$H_\nu = \sum_{k,\nu,i,\sigma} \epsilon_{k,\nu,i,\sigma} c_{k\nu i\sigma}^\dagger c_{k\nu i\sigma},$$

describe los cuatro cables metálicos marcados con ν (izquierda o derecha; también fuente o sumidero) que están acoplados los puntos i . En nuestro modelo, los dos puntos cuánticos en la región central se describen con dos dobletes con energías E_i , $i = 1, 2$ y una repulsión electrostática infinita dentro de cada punto y entre puntos

$$H_C = \sum_{i,\sigma} E_i d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \text{Coulomb repulsion}.$$

En este límite, no es posible tener más de un electrón en total. El acoplamiento entre los cables y los puntos se describe con el Hamiltoniano de mezcla,

$$H_{MIX} = \sum_{k\nu i\sigma} V_{\nu i} \left(c_{k\nu i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + H.c. \right),$$

donde tomamos elementos de matriz túnel independientes de impulso $V_{\nu i}$. Los acoplamientos de cada QD a fuente y sumidero son Γ_{Si} y Γ_{Di} , respectivamente, donde $\Gamma_{\nu i} = 2\pi|V_{\nu i}|^2\rho_{\nu i}$ y $\rho_{\nu i}$ es la densidad de estados de los electrones de conducción en el cable νi considerada constante.

La corriente

La corriente a través de cada punto cuántico I_n se puede calcular con la expresión general que se deriva en la Sec. A.7

$$I_n = \frac{e}{2h} \int d\omega \sum_{\sigma} \left\{ [\Gamma_{Sn}(\omega) f_{Sn}(\omega) - \Gamma_{Dn}(\omega) f_{Dn}(\omega)] [G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^r - G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^a](\omega) + [\Gamma_{Sn}(\omega) - \Gamma_{Dn}(\omega)] G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^<(\omega) \right\}. \quad (\text{D.1})$$

donde f_{Sn} (f_{Dn}) es la función de Fermi de los electrones en la fuente (el sumidero) acoplada al punto n . La corriente total se puede encontrar sumando

las contribuciones de ambos puntos cuánticos, $I = \sum_n I_n$. Las funciones de Keldysh que intervienen en el cálculo se definen (en condiciones estacionarias) como

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^<(t-t') = +i\langle d_{j\sigma}^\dagger(t')d_{i\sigma}(t)\rangle, \quad (\text{D.2})$$

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^>(t-t') = -i\langle d_{i\sigma}(t)d_{j\sigma}^\dagger(t')\rangle, \quad (\text{D.3})$$

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^r(t-t') = -i\theta(t-t')\langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle, \quad (\text{D.4})$$

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^a(t-t') = +i\theta(t'-t)\langle \{d_{i\sigma}(t), d_{j\sigma}^\dagger(t')\} \rangle. \quad (\text{D.5})$$

Representación en partículas auxiliares

En el límite considerado aquí de repulsión de Coulomb infinita, las posibles ocupaciones son el estado singlete representado como vacío $|0\rangle$ y los dobletes $|i\sigma\rangle$. La relación de completitud puede ser expresada como $Q = |0\rangle\langle 0| + \sum_{i\sigma} |i\sigma\rangle\langle i\sigma| = 1$. Estos estados pueden ser representados por partículas auxiliares a partir de la identificación

$$\begin{cases} |0\rangle \rightarrow b^\dagger|vac\rangle \\ |i\sigma\rangle \rightarrow f_{i\sigma}^\dagger|vac\rangle \end{cases}$$

donde $f_{i\sigma}^\dagger$ es el operador de creación de pseudo-fermiones y b^\dagger crea un bosón esclavo. En contraste con el caso SU(2) analizado en el **Apéndice B**, hay dos pseudo-fermiones. Los operadores de creación y destrucción para el fermión físico pueden escribirse en términos de las partículas auxiliares como $d_{i\sigma}^\dagger = f_{i\sigma}^\dagger b$.

El Hamiltoniano también puede escribirse en términos de partículas auxiliares. La repulsión de Coulomb infinita puede tenerse en cuenta imponiendo la restricción de $Q = 1$. Esto puede incluirse en el Hamiltoniano con un multiplicador de Lagrange, $K = H + \lambda Q$. Separando el Hamiltoniano como $K = K_0 + K_1$,

$$K_0 = H_L + H_R + \sum_{i\sigma} (E_i + \lambda) f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \lambda b^\dagger b, \quad (\text{D.6})$$

$$K_1 = \sum_{k\nu i\sigma} \left(V_{\nu i} c_{k\nu i\sigma}^\dagger b^\dagger f_{i\sigma} + H.c. \right), \quad (\text{D.7})$$

donde K_1 es tratado como una perturbación.

Representación de las funciones de Green

Las funciones de Green menores y mayores definidas en las Ecs. (D.2) y (D.3) se pueden calcular en términos de las funciones de Green de partículas auxiliares. Dentro de NCA, las funciones de Green físicas pueden calcularse como

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^<(t-t') \stackrel{NCA}{=} i\langle f_{j\sigma}^\dagger(t')f_{i\sigma}(t)\rangle\langle b(t')b^\dagger(t)\rangle,$$

porque no hay correlación entre el bosón esclavo y los pseudo-fermiones. Introduciendo las definiciones

$$G_{ij,\sigma}^<(t-t') = +i\langle f_{j\sigma}^\dagger(t')f_{i\sigma}(t)\rangle, \quad (\text{D.8})$$

$$G_{ij,\sigma}^>(t-t') = -i\langle f_{i\sigma}(t)f_{j\sigma}^\dagger(t')\rangle, \quad (\text{D.9})$$

$$D^<(t-t') = -i\langle b^\dagger(t')b(t)\rangle, \quad (\text{D.10})$$

$$D^>(t-t') = -i\langle b(t)b^\dagger(t')\rangle, \quad (\text{D.11})$$

las funciones de Green físicas se pueden expresar como una convolución de los propagadores de las partículas auxiliares

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^<(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi Q} G_{ij,\sigma}^<(\omega' + \omega) D^>(\omega'), \quad (\text{D.12})$$

$$G_{\mathbf{d}ij,\sigma}^>(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi Q} G_{ij,\sigma}^>(\omega' + \omega) D^<(\omega'). \quad (\text{D.13})$$

El operador Q viene del proceso de proyección en el espacio de $Q = 1$. La solución numérica del problema consiste en la determinación de $G_{ij,\sigma}^>$, $G_{ij,\sigma}^<$, $D^>$ y $D^<$.

Serie diagramática y expresiones analíticas

Las funciones de Green de no equilibrio de las partículas auxiliares pueden obtenerse auto-consistentemente dentro de NCA. La contribución menor a la ecuación de Dyson de no equilibrio se muestra en la Fig. D.2.

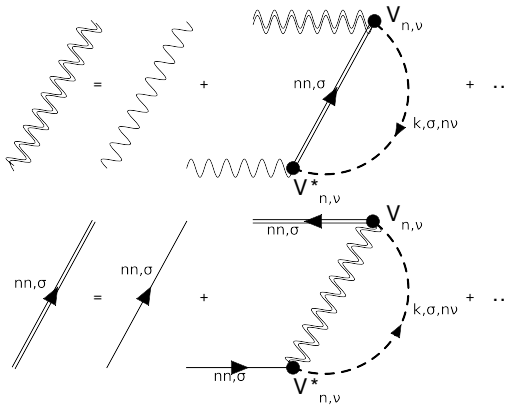


Figura D.2: Contribución menor a la ecuación de Dyson de no equilibrio en NCA.

Como se discutió en la Sec. C.5 del **Apéndice C**, es posible mostrar que la componente menor (mayor) de la ecuación de Dyson depende únicamente de la auto-energía menor (mayor)

$$\mathbf{G}^{\lessgtr} = \mathbf{G}^r \Sigma^{\lessgtr} \mathbf{G}^a, \quad (\text{D.14})$$

$$\mathbf{D}^{\lessgtr} = \mathbf{D}^r \Pi^{\lessgtr} \mathbf{D}^a. \quad (\text{D.15})$$

Las expresiones analíticas para las auto-energías pueden ser obtenidas a

partir de los diagramas burbujas en la Fig. D.2

$$\Sigma_{n,\sigma}^<(\omega) = -\sum_{\nu} \Gamma_{\nu n} \int \frac{d\omega'}{2\pi} f_{\nu n}(\omega - \omega') D^<(\omega'), \quad (\text{D.16})$$

$$\Pi^<(\omega) = -2 \sum_{\nu n} \Gamma_{\nu n} \int \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - f_{\nu n}(\omega' - \omega)) G_{nn,\sigma}^<(\omega'), \quad (\text{D.17})$$

$$\Sigma_{n,\sigma}^>(\omega) = \sum_{\nu} \Gamma_{\nu n} \int \frac{d\omega'}{2\pi} (1 - f_{\nu n}(\omega - \omega')) D^>(\omega'), \quad (\text{D.18})$$

$$\Pi^>(\omega) = 2 \sum_{\nu n} \Gamma_{\nu n} \int \frac{d\omega'}{2\pi} f_{\nu n}(\omega' - \omega) G_{nn,\sigma}^>(\omega'). \quad (\text{D.19})$$

Los auto-energías retardadas y avanzadas pueden calcularse a partir de las auto-energías mayores mediante una transformación Krammers-Kronning

$$\Sigma_{n,\sigma}^{r,a}(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Sigma_{n,\sigma}^>(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\eta}, \quad (\text{D.20})$$

$$\Pi^{r,a}(\omega) = i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Pi^>(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\eta}, \quad (\text{D.21})$$

donde el signo $+$ ($-$) es para las auto-energías retardadas (avanzadas). Las funciones de Green retardadas y avanzadas satisfacen ecuaciones de Dyson usuales

$$G_{nn,\sigma}^{r,a}(\omega) = (\omega - E_n - \lambda - \Sigma_{nn,\sigma}^{r,a})^{-1}, \quad (\text{D.22})$$

$$D^{r,a}(\omega) = (\omega - \lambda - \Pi^{r,a})^{-1}. \quad (\text{D.23})$$

Procedimiento numérico

Se propone una semilla inicial para los propagadores $G_n^<$ y $D^<$. Las auto-energías menores y mayores pueden calcularse utilizando las expresiones en las Ecs. (D.16) - (D.19). Con estas auto-energías, las retardadas y avanzadas pueden ser calculadas mediante la transformación de las Ecs. (D.20) y (D.21). A partir de las ecuaciones de Dyson en las Ecs. (D.22) y (D.23), las funciones de Green avanzadas y retardadas pueden también ser calculadas. Usando estas funciones de Green, junto con las auto-energías menores y mayores, los propagadores iniciales pueden ser re-calculados con las Ecs. (D.14) y (D.15), llamadas relaciones constitutivas. Este proceso tiene que ser iterado hasta la convergencia.

D.2. Conservación de la corriente

Presento una demostración de la conservación de la corriente a través de cada punto cuántico dentro de NCA.

El primer paso es utilizar la propiedad $G^r - G^a = G^> - G^<$ en la Ec. (D.1) para tener una expresión para la corriente sólo en términos de las funciones de Green menores y mayores

$$I_n = \frac{ei}{h} \int d\omega \{ [\Gamma_{S_n}(\omega) f_{S_n}(\omega) - \Gamma_{D_n}(\omega) f_{D_n}(\omega)] G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^> - [(f_{S_n}(\omega) - 1)\Gamma_{S_n}(\omega) - (f_{D_n}(\omega) - 1)\Gamma_{D_n}(\omega)] G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^<(\omega) \}.$$

Aquí la suma sobre el espín se ha realizado para dar un factor de 2. Esta expresión fue construida considerando $I_n = (I_{S_n} - I_{D_n})/2$ suponiendo $I_{D_n} = -I_{S_n}$. Para probar esto, es equivalente mostrar que $I_{S_n} + I_{D_n} = 0$. La suma de ambas contribuciones es

$$I_{S_n} + I_{D_n} = \frac{2ei}{h} \int d\omega \{ [\Gamma_{S_n}(\omega) f_{S_n}(\omega) + \Gamma_{D_n}(\omega) f_{D_n}(\omega)] G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^> - [(f_{S_n}(\omega) - 1)\Gamma_{S_n}(\omega) + (f_{D_n}(\omega) - 1)\Gamma_{D_n}(\omega)] G_{\mathbf{d}n,n\sigma}^<(\omega) \}.$$

El segundo paso es reemplazar las funciones de Green físicas por su representación en términos de partículas auxiliares (Ecs. (D.12) y (D.13)),

$$I_{S_n} + I_{D_n} = \frac{-2e}{h} \int d\omega \int \frac{d\omega'}{2\pi Q} \left\{ \sum_{\nu} \Gamma_{\nu n} f_{\nu n}(\omega) G_{nn,\sigma}^>(\omega' + \omega) D^<(\omega') + \sum_{\nu} \Gamma_{\nu n} (1 - f_{\nu n}(\omega)) G_{nn,\sigma}^<(\omega' + \omega) D^>(\omega') \right\}.$$

El siguiente paso es cambiar una de las variables de integración $\omega \rightarrow \omega = \omega'' - \omega'$ y reorganizar

$$I_{S_n} + I_{D_n} = \frac{-2e}{h} \int \frac{d\omega''}{Q} \left\{ \left(\int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{\nu} \Gamma_{\nu n} f_{\nu n}(\omega'' - \omega') D^<(\omega') \right) G_{nn,\sigma}^>(\omega'') + \left(\int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{\nu} \Gamma_{\nu n} (1 - f_{\nu n}(\omega'' - \omega')) D^>(\omega') \right) G_{nn,\sigma}^<(\omega'') \right\}.$$

Las expresiones entre paréntesis son las auto-energías definidas en las Ecs. (D.16) y (D.18), así

$$I_{S_n} + I_{D_n} = \frac{-2e}{h} \int \frac{d\omega''}{Q} \{ (-\Sigma_{n,\sigma}^<(\omega'')) G_{nn,\sigma}^>(\omega'') + (\Sigma_{n,\sigma}^>(\omega'')) G_{nn,\sigma}^<(\omega'') \}.$$

El último paso consiste en utilizar las relaciones constitutivas dadas en la Ec. (D.14)

$$I_{S_n} + I_{D_n} = \frac{-2e}{h} \int \frac{d\omega''}{Q} \{ -\Sigma_{n,\sigma}^< G_{nn,\sigma}^r \Sigma_{n,\sigma}^> G_{nn,\sigma}^a + \Sigma_{n,\sigma}^> G_{nn,\sigma}^r \Sigma_{n,\sigma}^< G_{nn,\sigma}^r \} (\omega''),$$

que es cero. La corriente a través de cada QD se conserva dentro de NCA.

Solución numérica para el acoplamiento electrón-fonón con NCA

Este apéndice es un complemento de los **Capítulos 11 - 13**. El objeto de estudio de estos capítulos es el efecto del acoplamiento de electrones y fonones en las propiedades de transporte. Esto es relevante en la descripción de transporte a través de moléculas, donde la adición (o substracción) de carga eléctrica puede generar el estiramiento (o contracción) de las ligaduras para minimizar la energía electrostática. Esto conduce a un acoplamiento entre la carga en la molécula y los modos de vibración. Como objetivo final, queremos estudiar el efecto de los fonones en los fenómenos de interferencia. En esta medida se ha modificado el modelo de Aligia para tratar la interferencia en los sistemas interactuantes para incluir el acoplamiento de electrones y fonones. En un cierto límite, el modelo se reduce al de Anderson-Holstein. Nosotros usamos la aproximación *non-crossing* (NCA) para resolver el problema interactuante en la presencia de fonones.

Presento aquí los detalles relativos a la solución numérica. En la Sec. E.1 se introduce la modificación del modelo de interferencia con el acoplamiento de electrones y fonones. Las expresiones diagramáticas de la NCA se derivan en la Sec. E.2. Al final de esta sección hay una prueba del hecho de que los fonones no están vestidos en la aproximación *non-crossing*. En la Sec. E.3 se derivan las expresiones analíticas de las auto-energías que implican al propagador de los fonones. Las expresiones en el caso particular del modelo de Anderson-Holstein SU(2) se presentan en la Sec. E.4.

E.1. El modelo

El modelo de Aligia se describe en el **Capítulo 5**. El modelo considera dos dobletes de espín, ambos están acoplados a un par de cables izquierda-derecha. El Hamiltoniano es

$$\begin{aligned}
 H_{\text{Aligia}} = & \sum_{\nu k \sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k \sigma}^{\dagger} c_{\nu k \sigma} + \sum_{i \sigma} E_i d_{i \sigma}^{\dagger} d_{i \sigma} + \sum_{i \nu k \sigma} (V_{\nu}^i d_{i \sigma}^{\dagger} c_{\nu k \sigma} + \text{H.c.}) \\
 & + \sum_i U d_{i \uparrow}^{\dagger} d_{i \uparrow} d_{i \downarrow}^{\dagger} d_{i \downarrow} + \text{inter-level Coulomb repulsion,}
 \end{aligned}$$

donde $d_{i\sigma}^\dagger$ ($d_{i\sigma}$) crea (destruye) un electrón en el estado localizado $i = 1, 2$ con espín σ , $c_{\nu k\sigma}^\dagger$ crea un electrón de conducción en la izquierda ($\nu = L$) o derecha ($\nu = R$) con momento k y espín σ y V_ν^i es el elemento de matriz túnel entre el cable ν y el doblete i , supuesto independiente de k . Mediante transformaciones de calibre, tres de los cuatro V_ν^i se pueden hacer reales y positivos. El salto efectivo restante puede ser elegido como $V_R^2 = |V_R^2|e^{-i\phi}$, donde ϕ es una fase que depende de la simetría de los estados y de la geometría de la conexión. La doble ocupación de cada doblete está penalizada con U debido a la repulsión de Coulomb y también hay una interacción de repulsión entre los niveles. Hemos resuelto este Hamiltoniano en el límite de repulsión de Coulomb muy grande intra e inter-puntos. Esto prohíbe tener un número total de electrones mayor que uno en los niveles localizados.

Los modos de vibración de la molécula se describen con el Hamiltoniano

$$H_{ph} = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha},$$

donde a_{α} y a_{α}^{\dagger} son los operadores de destrucción y creación para el modo de vibración α de frecuencia ω_{α} .

El acoplamiento electrón-fonón se describe como una fuerza que cambia la posición de equilibrio del oscilador proporcionalmente a la carga electrónica, i.e. a la ocupación $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma}$. El Hamiltoniano es

$$H_{e-ph} = \sum_{i\alpha\sigma} \lambda_{i\alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma},$$

donde $\lambda_{i\alpha}$ es la constante de acoplamiento entre el nivel de i y el modo α .

El Hamiltoniano completo es un Hamiltoniano de Holstein-Anderson extendido,

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\nu k\sigma} \epsilon_{\nu k} c_{\nu k\sigma}^{\dagger} c_{\nu k\sigma} + \sum_{\alpha} \Omega_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \sum_{i\sigma} E_i d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + \text{Coulomb repulsion} \\ & + \sum_{i\nu k\sigma} (V_{\nu}^i d_{i\sigma}^{\dagger} c_{\nu k\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i\alpha\sigma} \lambda_{i\alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^{\dagger}) d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

E.2. La aproximación *non-crossing*

Representación en términos de partículas auxiliares

Dentro de la aproximación *non-crossing* el singlete y los dobletes $\{|S\rangle, |i\sigma\rangle\}$ son representados por partículas auxiliares. Con la identificación

$$\begin{cases} |S\rangle \rightarrow b^{\dagger} |vac\rangle \\ |i\sigma\rangle \rightarrow f_{i\sigma}^{\dagger} |vac\rangle \end{cases},$$

el singlete es representado por un bosón esclavo b^{\dagger} y los dobletes de dos pseudo-fermiones $f_{i\sigma}^{\dagger}$. El número total de partículas en los niveles localizados es

$$Q = b^{\dagger} b + \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma},$$

y la condición $Q = 1$ se impone para garantizar la repulsión de Coulomb infinita. Teniendo esto en cuenta con un multiplicador de Lagrange Λ en el Hamiltoniano, $K = H + \Lambda Q$. Este se puede escribir en la representación de partículas auxiliares y separar como $K = K_0 + K_1$ donde

$$K_0 = H_L + H_R + \sum_{i\sigma} (E_i + \Lambda) f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \Lambda b^\dagger b + \sum_{\alpha} \Omega_{\alpha} a_{\alpha}^\dagger a_{\alpha}, \quad (\text{E.2})$$

$$K_1 = \sum_{k\nu i\sigma} \left(V_{\nu}^i c_{k\nu\sigma}^\dagger b^\dagger f_{i\sigma} + H.c. \right) + \sum_{i\alpha\sigma} \lambda_{i\alpha} (a_{\alpha} + a_{\alpha}^\dagger) f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}, \quad (\text{E.3})$$

donde K_1 es tratado como una perturbación. Hay dos contribuciones a K_1 : una es el acoplamiento a los **electrones de conducción** y la otra es el acoplamiento a los **fonones**. Dentro de la NCA ambos acoplamientos son tratados en pie de igualdad.

Expresiones diagramáticas

La aproximación *non-crossing* es una aproximación diagramática no perturbativa donde se consideran procesos de todos los órdenes en perturbaciones. Sin tener en cuenta los diagramas que tienen cruces de propagadores de electrones de conducción, una resumación de la serie diagramática es posible. Las funciones de Green vestidas se pueden obtener resolviendo un conjunto de ecuaciones de Dyson auto-consistentes, las ecuaciones de la NCA.

Los vértices de la perturbación se puede construir del Hamiltoniano K_1 en la Ec. (E.3). Se muestran en la Fig. E.1.

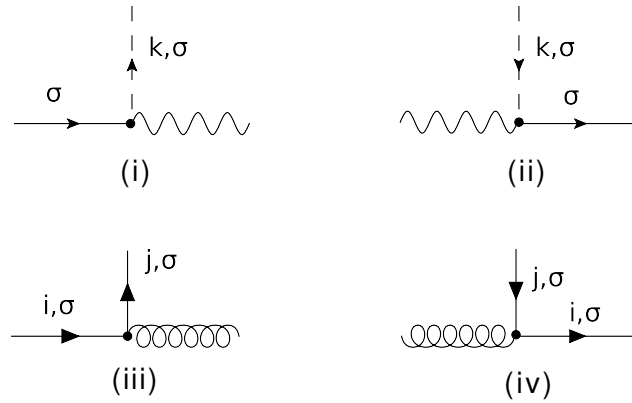


Figura E.1: Vértices para la serie perturbativa tomados de K_1 y descriptos en el texto.

El proceso (i) ((ii)) representa la destrucción (creación) de un electrón en el nivel de i en la molécula y la creación simultánea (destrucción) de un electrón de conducción y un bosón esclavo. El propagador de los electrones localizados (de conducción) se representa con una flecha de línea continua (línea discontinua) mientras el propagador del bosón esclavo se representa con una línea ondulada. Los procesos (iii) y (iv) son los que implican al

modo de vibración. El propagador de fonones se representa con una línea helicoidal. En (iii) ((iv)) un fonón se crea (se absorbe).

Presento aquí una derivación diferente de las auto-energías NCA basada en la construcción de funcionales. Según Baym y Kadanof, las expresiones de auto-energía se pueden encontrar mediante la diferenciación de los funcionales con respecto a la función de Green apropiada. Los funcionales pueden ser contruidos a partir de los vértices que se muestran en la Fig. E.1. Hay dos funcionales que se muestran en la Fig. E.2.

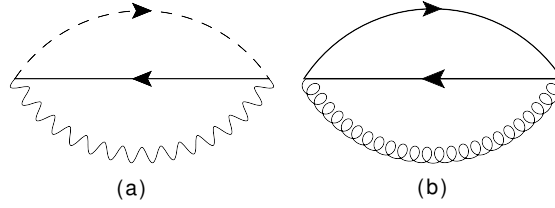


Figura E.2: Funcionales contruidos a partir de K_1 . Representan el acoplamiento a (a) los electrones de conducción y (b) los fonones.

El funcional $\mathcal{F}_e[G_{i\sigma}, G_b, G_{k\sigma}]$ que se muestra en la Fig. E.2(a) es el funcional usual de la NCA para los grados de libertad electrónicos y el que se muestra en (b), $\mathcal{F}_{ph}[G_{i\sigma}, G_{j\sigma}, G_\alpha]$, es el nuevo que describe el acoplamiento con los fonones. Las auto-energías se pueden obtener por diferenciación, $G_x = \delta\mathcal{F}/\delta G_x$. Se muestran en la Fig. E.3.

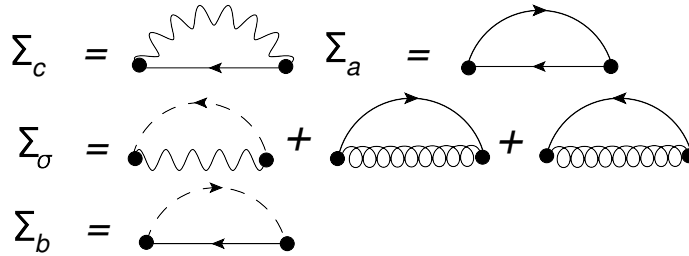


Figura E.3: Auto-energías obtenidas por diferenciación de los funcionales.

A partir de estas auto-energías, se puede demostrar que la auto-energía para los electrones de conducción Σ_c y para los fonones Σ_a son cero dentro de NCA. Esto ocurre debido a que son correcciones en el que dos partículas auxiliares ocupan los niveles al mismo tiempo. Esto está prohibido por la restricción $Q = 1$. Como se discutió en la Sec. B.4, cuando el límite de $\Lambda \rightarrow \infty$ es tomado para proyectar en el espacio físico con $Q = 1$, estas auto-energías se anulan. Los electrones de conducción y los fonones no están vestidos dentro de la aproximación *non-crossing*. La prueba se da aquí para Σ_a .

Demostración $\Sigma_a = 0$

La traducción de los diagramas para obtener las expresiones analíticas se puede hacer siguiendo algunas reglas simples:

- 1- Etiquetar los propagadores. El pseudo-fermión tiene la etiqueta de i, σ , el de los electrones de conducción $k\sigma$ y el de fonones α .
- 2- Asignar el valor correspondiente del acoplamiento al vértice: $V_{j\nu}$ o $\lambda_{i\alpha}$. Las magnitudes físicas (energía, impulso, espín) deben ser conservados en cada vértice.
- 3- Asignar las energías teniendo en cuenta que los diagramas de auto-energía tienen una entrada de energía $i\omega_n$. Es más fácil para asignar la energía $i\nu_n$ a uno de los propagadores y definir las otras energías por conservación.
- 4- Sumar sobre los grados de libertad internos: $k, i\nu_n, \sigma$, recordando el factor $\frac{1}{\beta}$ correspondiente a cada suma de Matsubara.
- 5- Multiplicar por $(-1)^{m+F}$, donde F es el número de bucles fermiónicos en el diagrama y m es
 - para auto-energías bosónicas, la mitad del número de vértices,
 - para auto-energías fermiónicas, el número de propagadores bosónicos internos.

La auto-energía del fonón $\Sigma_a^\Lambda(i\omega_n) = \Sigma_\alpha^\Lambda(i\omega_n)$ es bosónica e incluye dos propagadores de pseudo-fermiones $G_{i\sigma}^\Lambda$. El superíndice Λ es para recordar que el cálculo se realiza en el ensamble gran canónico, con un número arbitrario de partículas. De acuerdo con las reglas establecidas anteriormente

$$\Sigma_\alpha^\Lambda(i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{i\sigma} \lambda_{i\alpha}^2 G_{i\sigma}^\Lambda(i\omega_n + i\nu_n) G_{i\sigma}^\Lambda(i\nu_n),$$

donde usando la representación espectral

$$\Sigma_\alpha^\Lambda(i\omega_n) = \sum_{i\sigma} \lambda_{i\alpha}^2 \int dy \int dx \rho_{i\sigma}^\Lambda(x) \rho_{i\sigma}^\Lambda(y) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - x} \frac{1}{i\nu_n - y} \right).$$

La expresión entre paréntesis es una suma de Matsubara

$$S = \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - x} \frac{1}{i\nu_n - y},$$

en la frecuencia fermiónica $i\nu_n$. El resultado es

$$S = \frac{f(x)}{x - i\omega_n - y} + \frac{f(y)}{y + i\omega_n - x},$$

donde $f(x)$ es la función de distribución de Fermi. Por tanto

$$\Sigma_\alpha^\Lambda(i\omega_n) = \sum_{i\sigma} \lambda_{i\alpha}^2 \int dx \rho_{i\sigma}^\Lambda(x) f(x) \int dy \left(\frac{\rho_{i\sigma}^\Lambda(y)}{x - i\omega_n - y} + \frac{\rho_{i\sigma}^\Lambda(y)}{x + i\omega_n - y} \right),$$

donde las funciones de Green se pueden recuperar de nuevo,

$$\Sigma_{\alpha}^{\Lambda}(i\omega_n) = \sum_{i\sigma} \lambda_{i\alpha}^2 \int dx \rho_{i\sigma}^{\Lambda}(x) f(x) [G_{i\sigma}^{\Lambda}(x - i\omega_n) + G_{\sigma}^{\Lambda}(x + i\omega_n)] .$$

Como se explica en la Sec. B.4, la proyección al espacio con $Q = 1$ se hace primero cambiando $x \rightarrow x + \Lambda$,

$$\Sigma_{\alpha}^{\Lambda}(i\omega_n) = \sum_{i\sigma} \lambda_{i\alpha}^2 \int dx \rho_{i\sigma}^{\Lambda}(x + \Lambda) f(x + \Lambda) [G_{i\sigma}^{\Lambda}(x + \Lambda - i\omega_n) + G_{\sigma}^{\Lambda}(x + \Lambda + i\omega_n)] ,$$

y luego tomando el límite de $\Lambda \rightarrow \infty$. De acuerdo con las Ecs. (B.12) y (B.13), $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} G_{i\sigma}^{\Lambda}(x + \Lambda) = G_{i\sigma}(x)$, y $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \rho_{i\sigma}^{\Lambda}(x + \Lambda) = \rho_{i\sigma}(x)$.

Para la función de Fermi, $f(x + \Lambda) = e^{-\beta\Lambda}[e^{\beta x} + e^{-\beta\Lambda}]^{-1}$, por lo tanto

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \Sigma_{\alpha}^{\Lambda}(i\omega_n) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} e^{-\beta\Lambda} \sum_{i\sigma} \lambda_{i\alpha}^2 \int dx e^{-\beta x} \rho_{i\sigma}(x) [G_{i\sigma}^{\Lambda}(x - i\omega_n) + G_{\sigma}^{\Lambda}(x + i\omega_n)] ,$$

lo que da $\Sigma_{\alpha}(i\omega_n) = 0$. Los fonones no se renormalizan en NCA y $G_{\alpha}(i\omega_n) = [i\omega_n - \omega_{\alpha}]^{-1}$.

E.3. Expresión analítica para las nuevas auto-energías

Siguiendo las mismas reglas indicadas anteriormente es posible escribir las expresiones analíticas de las contribuciones de fonones a la auto-energía del pseudo-fermión.

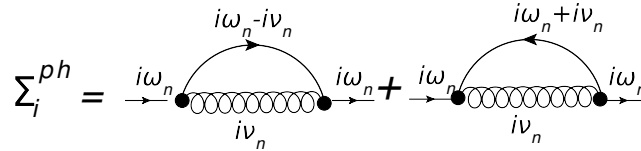


Figura E.4: Contribución de los fonones a la auto-energía del pseudo-fermión.

Los diagramas se muestran en la Fig. E.4 e incluyen un propagador de fonones G_{α}^{Λ} y un pseudo-fermión $G_{i\sigma}^{\Lambda}$. En primer lugar, los propagadores se etiquetan y se multiplica por la constante de acoplamiento del vértice,

$$\lambda_{i\alpha}^2 G_{\alpha}^{\Lambda}() G_{i\sigma}^{\Lambda}(),$$

En segundo lugar, las frecuencias se asignan como en la figura

$$\lambda_{i\alpha}^2 G_{\alpha}^{\Lambda}(i\nu_n) [G_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n - i\nu_n) + G_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n + i\nu_n)] .$$

Dado que es una auto-energía fermiónica, que no hay bucles fermiónicos y que hay sólo un propagador bosónico, $(-1)^{m+F} = -1$. Haciendo una suma

sobre los grados de libertad internos: la frecuencia Matsubara $i\nu$ y el índice del modo de vibración,

$$\Sigma_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n) = \frac{-1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{\alpha} \lambda_{i\alpha}^2 G_{\alpha}^{\Lambda}(i\nu_n) [G_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n - i\nu_n) + G_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n + i\nu_n)].$$

Escribiendo explícitamente al propagador de fonones,

$$\Sigma_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n) = \frac{-1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{\alpha} \lambda_{i\alpha}^2 \frac{1}{i\nu_n - \Omega_{\alpha}} [G_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n - i\nu_n) + G_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n + i\nu_n)],$$

y usando la representación espectral $\Sigma_{i\sigma}^{\Lambda}(i\omega_n) =$

$$= \frac{-1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \sum_{\alpha} \frac{\lambda_{i\alpha}^2}{i\nu_n - \Omega_{\alpha}} \int dx \rho_{i\sigma}^{\Lambda}(x) \left[\frac{1}{i\omega_n - i\nu_n - x} + \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - x} \right],$$

que puede ser escrito como

$$\Sigma_{i\sigma}^{\Lambda, \text{ph}}(i\omega_n) = \sum_{\alpha} \lambda_{i\alpha}^2 \int dx \rho_{i\sigma}^{\Lambda}(x) S,$$

en términos de la suma de Matsubara

$$S = \frac{-1}{\beta} \sum_{i\nu_n} \left[\frac{1}{i\nu_n - \Omega_{\alpha}} \frac{1}{i\omega_n - i\nu_n - x} + \frac{1}{i\nu_n - \Omega_{\alpha}} \frac{1}{i\omega_n + i\nu_n - x} \right].$$

El resultado de la suma en la frecuencia bosónica $i\nu_n$ es

$$S = \frac{b(\Omega_{\alpha})}{-\Omega_{\alpha} + i\omega_n - x} + \frac{b(\Omega_{\alpha})}{\Omega_{\alpha} + i\omega_n - x} + \frac{f(-x)}{i\omega_n - x - \Omega_{\alpha}} + \frac{f(x)}{i\omega_n - x + \Omega_{\alpha}},$$

donde $b(z) = [e^{\beta z} - 1]^{-1}$ es la distribución de Bose-Einstein. Usando el hecho de que $f(-x) = 1 - f(x)$,

$$S = \frac{b(\Omega_{\alpha}) + 1}{-\Omega_{\alpha} + i\omega_n - x} + \frac{b(\Omega_{\alpha})}{\Omega_{\alpha} + i\omega_n - x} + \frac{-f(x)}{i\omega_n - x - \Omega_{\alpha}} + \frac{f(x)}{i\omega_n - x + \Omega_{\alpha}}.$$

Los dos últimos términos que dependen de la función de Fermi se anulan en el límite de $\Lambda \rightarrow \infty$. La auto-energía es

$$\Sigma_{i\sigma}^{\Lambda, \text{ph}}(i\omega_n) = \sum_{\alpha} \lambda_{i\alpha}^2 \int dx \rho_{i\sigma}^{\Lambda}(x) \left[\frac{b(\Omega_{\alpha}) + 1}{-\Omega_{\alpha} + i\omega_n - x} + \frac{b(\Omega_{\alpha})}{\Omega_{\alpha} + i\omega_n - x} \right],$$

donde las funciones de Green se pueden recuperar de la representación espectral y se puede tomar el límite $\Lambda \rightarrow \infty$

$$\Sigma_{i\sigma}^{\text{ph}}(i\omega_n) = \sum_{\alpha} \lambda_{i\alpha}^2 [(b(\Omega_{\alpha}) + 1)G_{i\sigma}(i\omega_n - \Omega_{\alpha}) + b(\Omega_{\alpha})G_{i\sigma}(i\omega_n + \Omega_{\alpha})], \quad (\text{E.4})$$

E.4. Caso especial: un nivel y un solo modo de vibración

En el caso en que sólo el acoplamiento de un modo de vibración a un localizado nivel $i = 1$ es relevante, $\lambda_{i\alpha} = \lambda\delta_{i1}\delta_{\alpha0}$. En este caso,

$$\Sigma_{1\sigma}^{\text{ph}}(i\omega_n) = \lambda^2 [(b(\Omega_0) + 1)G_{1\sigma}(i\omega_n - \Omega_0) + b(\Omega_0)G_{1\sigma}(i\omega_n + \Omega_0)]. \quad (\text{E.5})$$

Se puede observar que esta nueva auto-energía mezcla los espacios con $\pm n$ fonones. Ese es el origen de las réplicas.

Bibliografía

- Aharonov, Y. and Bohm, D. (1959). Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *The Physical Review*, 115:485.
- Aharonov, Y. and Casher, A. (1984). Topological quantum effects for neutral particles. *Phys. Rev. Lett.*, 53:319.
- Aligia, A. A. and Salguero, L. A. (2004). Magnetotransport through a quantum wire side coupled to a quantum dot. *Physical Review B*, 70:075307.
- Amasha, S., Keller, A. J., Rau, I. G., Carmi, A., Katine, J. A., Shtrikman, H., Oreg, Y., and Goldhaber-Gordon, D. (2013). Pseudospin-resolved transport spectroscopy of the kondo effect in a double quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 110:046604.
- Anderson, P. W. (1961). Localized Magnetic States in Metals. *Physical Review*, 124:41–53.
- Anderson, P. W. (1970). A poor man's derivation of scaling laws for the kondo problem. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 3:2436.
- Ando, T., Fowler, A. B., and Stern, F. (1982). Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.*, 54:437.
- Aradhya, S. V. and Venkataraman, L. (2013). Single-molecule junctions beyond electronic transport. *Nature Nanotechnology*, 8:399.
- Atatüre, M., Dreiser, J., Badolato, A., Högele, A., Karrai, K., and Imamoglu, A. (2006). Quantum-dot spin-state preparation with near-unity fidelity. *Science*, 312:551.
- Baca, A. G., Ren, F., Zolper, J. C., Briggs, R. D., and Pearton, S. J. (1997). A survey of ohmic contacts to iii-v compound semiconductors. *Thin Solid Films*, 308-309:599–60.
- Ballmann, S., Härtle, R., Coto, P. B., Elbing, M., Mayor, M., Bryce, M. R., Thoss, M., and Weber, H. B. (2012). Experimental evidence for quantum interference and vibrationally induced decoherence in single-molecule junctions. *Phys. Rev. Lett.*, 109:056801.
- Balseiro, C. A., Cornaglia, P. S., and Grempel, D. R. (2006). Electron-phonon correlation effects in molecular transistors. *Phys. Rev. B*, 74:235409.

- Bas, P. R. (2010). Universal scaling in transport out of equilibrium through a single quantum dot using the non-crossing approximation. *Physical Review B*, 81:155327.
- Bas, P. R. and Aligia, A. A. (2009). Nonequilibrium transport through a singlet-triplet anderson impurity. *Physical Review B*, 80:035308.
- Baym, G. (1962). Self-consistent approximations in many-body systems. *Physical Review*, 127:1391–1401.
- Baym, G. and Kadanoff, L. P. (1961). Conservation laws and correlation functions. *Physical Review*, 124:287.
- Beenakker, C. W. J. and van Houten, H. (1991). Quantum transport in semiconductor nanostructures. *Solid State Physics*, 44:1.
- Berezovsky, J., Mikkelsen, M. H., Stoltz, N. G., Caldren, L. A., and Awschalom, D. D. (2008). Picosecond coherent optical manipulation of a single electron spin in a quantum dot. *Science*, 320:349.
- Bergsten, T., Kobayashi, T., Sekine, Y., and Nitta, J. (2006). Experimental demonstration of the time reversal aharonov-casher effect. *Phys. Rev. Lett.*, 97:196803.
- Binosi, D. and Theussl, L. (2004). Jaxodraw: A graphical user interface for drawing feynman diagrams. *Computer Physics Communications*, 161:76.
- Borda, L., Zaránd, G., Hofstetter, W., Halperin, B. I., and von Delft, J. (2003). $Su(4)$ fermi liquid state and spin filtering in a double quantum dot system. *Phys. Rev. Lett.*, 90:026602–1.
- Brickers, N. E. (1987). Review of techniques in the large- n expansion for dilute magnetic alloys. *Reviews of Modern Physics*, 59:845.
- Brickers, N. E., Cox, D. L., and Wilkins, J. W. (1987). Self-consistent large- N expansion for normal-state properties of dilute magnetic alloys. *Physical Review B*, 36:2036–2079.
- Bruus, H. and Flensberg, K. (2004). *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford University Press.
- Büttiker, M. (1986). Four terminal phase-coherent conductance. *Physical Review Letters*, 57:1761.
- Cardamone, D. M., Stafford, C. A., and Mazumdar, S. (2006). Controlling quantum transport through a single molecule. *Nano Lett.*, 6:2423.
- Chakraborty, T. and Pietiläinen, P. (2013). *The Quantum Hall Effects: Integral and Fractional*. Springer Science and Business Media.

- Chandrasekhar, V., Rooks, M. J., Wind, S., and Prober, D. E. (1985). Observation of aharonov-bohm electron interference effects with period h/e and $h/2e$ in individual micron-size, normal-metal rings. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1610.
- Chen, J. C., Chang, A. M., and Melloch, M. R. (2004). Transition between quantum states in a parallel-coupled double quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 92:176801.
- Coleman, P. (1984). New approach to the mixed-valence problem. *Physical Review B*, 29:3035–3044.
- Cornaglia, P. S., Grepel, D. R., and Ness, H. (2005). Quantum transport through a deformable molecular transistor. *Phys. Rev. B*, 71:075320.
- Cornaglia, P. S., Ness, H., and Grepel, D. R. (2004). Many-body effects on the transport properties of single-molecule devices. *Phys. Rev. Lett.*, 93:147201–1.
- Cornaglia, P. S., Usaj, G., and Balseiro, C. A. (2007). Electronic transport through magnetic molecules with soft vibrating modes. *Phys. Rev. B*, 76:241403(R).
- Costi, T. A. (2000). Kondo effect in a magnetic field and the magnetoresistivity of kondo alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 85:1504.
- Costi, T. A. (2010). Thermoelectric transport through strongly correlated quantum dots. *Phys. Rev. B*, 81:235127.
- Costi, T. A., Hewson, A. C., and Zlatić, V. (1994). Transport coefficients of the anderson model via the numerical renormalization group. *J. Phys. Cond. Matt.*, 6:2519.
- Costi, T. A., Kroha, J., and Wölfle, P. (1995). Spectral properties of the Anderson impurity model: Comparison of numerical-renormalization-group and non-crossing approximation results. *Physical Review B*, 53:1850–1865.
- Craig, N. J., Taylor, J. M., Lester, E. A., Marcus, C. M., Hanson, M. P., and Gossard, A. C. (2004). Tunable nonlocal spin control in a coupled-quantum dot system. *Science*, 304:565.
- Cronenwett, S. M., Oesterkamp, T. H., and Kouwenhoven, L. P. (1998). A tunable kondo effect in quantum dots. *Science*, 281:540.
- Cuevas, J. C. and Scheer, E. (2010). *Molecular Electronics. An Introduction to Theory and Experiment*. World Scientific.
- Dadosh, T., Gordin, Y., Krahne, R., Khivrich, I., Mahalu, D., Frydman, V., Sperling, J., Yacoby, A., and Bar-Joseph, I. (2005). Measurement of the conductance of single conjugated molecules. *Nature*, 436:677.

- Danilov, A., Kubatkin, S., Kafanov, S., rd, P. H., Stuhr-Hansen, N., Moth-Poulsen, K., and rnholm, T. B. (2008). Electronic transport in single molecule junctions: Control of the molecule-electrode coupling through intramolecular tunneling barriers. *Nano Lett.*, 8:1.
- Datta, S. (2003). *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press.
- Datta, S. (2005). *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge University Press.
- Delgado, F., Shim, Y.-P., Korkusinski, M., Gaudreau, L., Studenikin, S. A., Sachrajda, A. S., and Hawrylak, P. (2008). Spin-selective aharonov-bohm oscillations in a lateral triple quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 101:226810.
- Devoret, M. and Glatthli, C. (1998). Single-electron transistors. *Phys. World*, 11:22.
- Drummond, T. J., Masselink, W. T., and Morkoc, H. (1986). Modulation-doped gaas/(al,ga)as heterojunction field-effect transistors: Modfets. *Proceedings of the IEEE*, 74:773.
- Duruo, C. I. (1996). *low temperature transport in quantum dot arrays*. PhD thesis, Stanford University.
- E. M. Lifshitz, L. P. P. (1981). *Physical kinetics*. Butterworth-Heinemann.
- Engel, H.-A., Kouwenhoven, L., Loss, D., and Marcus, C. (2004). Controlling spin qubits in quantum dots. *Quantum Information Processing*, page 115.
- Esteve, D. (1992). Transferring electrons one by one. pp. 109-138 in *Single Charge Tunneling (Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures)* edited by H. Grabert and M.H. Devoret, Plenum, New York.
- Fernández-Torrente, I., Franke, K. J., and Pascual, J. I. (2008). Vibrational kondo effect in pure organic charge-transfer assemblies. *Phys. Rev. Lett.*, 101:217203.
- Ferry, D. and Goodnick, S. (1997). *Transport in Nanostructures*. Cambridge U.P., Cambridge.
- Fetter, A. L. and Walecka, J. D. (2003). *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Dover Publications.
- Fisher, D. S. and Lee, P. A. (1981). Relation between conductivity and transmission matrix. *Phys. Rev. B*, 23:6851.
- Florens, S., Freyn, A., Roch, N., Wernsdorfer, W., Balestro, F., Roura-Bas, P., and Aligia, A. A. (2011). Universal transport signatures in two-electron molecular quantum dots: gate-tunable hund's rule, underscreened kondo effect and quantum phase transitions. *J. Phys. Condens. Matter*, 23:243202.

- Frey, T., Leek, P. J., Beck, M., Blais, A., Ihn, T., Ensslin, K., and Wallraff, A. (2012). Dipole coupling of a double quantum dot to a microwave resonator. *Phys. Rev. Lett.*, 108:046807.
- Galpin, M. R., Logan, D. E., and Krishnamurthy, H. R. (2005). Quantum phase transition in capacitively coupled double quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 94:186406.
- Gaudreau, L., Granger, G., Kam, A., Aers, G. C., Studenikin, S. A., Zawadzki, P., Pioro-Ladrière, M., R. Wasilewski, Z., and Sachrajda, A. S. (2012). Coherent control of three-spin states in a triple quantum dot. *Nature Physics*, 8:54.
- Gaudreau, L., Studenikin, S. A., Sachrajda, A. S., Zawadzki, P., Kam, A., Lapointe, J., Korkusinski, M., and Hawrylak, P. (2006). Stability diagram of a few-electron triple dot. *Phys. Rev. Lett.*, 97:036807.
- Gellmann, M. and Low, F. (1951). Bound states in quantum field theory. *Physical Review*, 84:350–354.
- Gerland, U., von Delft, J., Costi, T. A., and Oreg, Y. (2000). Transmission phase shift of a quantum dot with kondo correlations. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3710.
- Girvin, S. M. (1999). *The Quantum Hall Effect: Novel Excitations and Broken Symmetries in Ecole d'Été Les Houches 1998*. Springer Verlag.
- Glazman, L. and Raikh, M. (1988). Resonant kondo transparency of a barrier with quasilocal impurity states. *JETP Lett.*, 47:452.
- Goerbig, M. O. (2009). Quantum hall effects. *arXiv: cond-mat/9907002*.
- Goldhaber-Gordon, D., Göres, J., Kastner, M. A., Shtrikman, H., Mahalu, D., and Meirav, U. (1998a). From the Kondo Regime to the Mixed-Valence Regime in a Single-Electron Transistor. *Physical Review Letters*, 81:5225.
- Goldhaber-Gordon, D., Shtrikman, H., Mahalu, D., Abusch-Magder, D., Meirav, U., and Kastner, M. A. (1998b). Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, 391:156.
- Grabert, H. and Devoret, M. (1992). *Single Charge Tunneling (Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures)*. Plenum, New York.
- Greilich, A., Oulton, R., Zhukov, E. A., Yugova, I. A., Yakovlev, D. R., Bayer, M., Shabaev, A., Efros, A. L., Merkulov, I. A., Stavarache, V., Reuter, D., and Wieck, A. (2006a). Optical control of spin coherence in singly charged (in; ga)as/gaas quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 96:227401.
- Greilich, A., Yakovlev, D. R., Shabaev, A., Efros, A. L., Yugova, I. A., Oulton, R., Stavarache, V., Reuter, D., Wieck, A., and Bayer, M. (2006b). Mode locking of electron spin coherence in singly charged quantum dots. *Science*, 313:341.

- Greuter, L. (2009). *Fabrication and Characterization of Ohmic Contacts*. PhD thesis, University of Basel.
- Grobis, M., Rau, L. G., Potok, R. M., Shtrikman, H., and Goldhaber-Gordon, D. (2008). Universal scaling in nonequilibrium transport through a single channel kondo dot. *Physical Review Letters*, 100:246601.
- Guédon, C. M., Valkenier, H., Markussen, T., Thygesen, K. S., Hummelen, J. C., and van der Molen, S. J. (2012). Observation of quantum interference in molecular charge transport. *Nature Nanotechnology*, 7:305.
- Haldane, F. D. M. (1978a). Scaling theory of the asymmetric anderson model. *Physical Review Letters*, 40:417.
- Haldane, F. D. M. (1978b). Theory of the atomic limit of the anderson model: I. perturbation expansions re-examined. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 11:5015.
- Halperin, B. I. (1982). Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Phys. Rev. B*, 25:2185.
- Hanson, R., Kouwenhoven, L. P., Petta, J. R., Tarucha, S., and Vandersypen, L. M. K. (2007). Spins in few-electron quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, 79:1217.
- Härtle, R., Butzin, M., Rubio-Pons, O., and Thoss, M. (2011). Quantum interference and decoherence in single-molecule junctions: How vibrations induce electrical current. *Phys. Rev. Lett.*, 107:046802.
- Haule, K., Kirchner, S., Kroha, J., and Wölfle, P. (2001). Anderson impurity model at finite Coulomb interaction U : Generalized noncrossing approximation. *Physical Review B*, 64:155111.
- Hewson, A. and Meyer, D. (2002). Numerical renormalization group study of the anderson-holstein impurity model. *J. Phys.: Condens. Matter*, 14:427.
- Hewson, A. C. (1997). *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press.
- Hofstetter, W., König, J., and Schoeller, H. (2001). Kondo correlations and the fano effect in closed aharonov-bohm interferometers. *Phys. Rev. Lett.*, 87:156803.
- Holleitner, A. W., Blick, R. H., Hüttel, A. K., Eberl, K., and Kotthaus, J. P. (2002). Probing and controlling the bonds of an artificial molecule. *Science*, 297:70.
- Holleitner, A. W., Chudnovskiy, A., Pfannkuche, D., Eberl, K., and Blick, R. H. (2004). Pseudospin kondo correlations versus hybridized molecular states in double quantum dots. *Phys. Rev. B*, 70:075204.

- Hübel, A., Held, K., Weis, J., and v. Klitzing, K. (2008). Correlated electron tunneling through two separate quantum dot systems with strong capacitive interdot coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 101:186804.
- Huibers, A. G. A. (1999). *Electron transport and dephasing in semiconductor quantum dots*. PhD thesis, Stanford University.
- Hwang, H. Y., Iwasa, Y., Kawasaki, M., Keimer, B., Nagaosa, N., and Tokura, Y. (2012). Emergent phenomena at oxide interfaces. *Nature Materials*, 11:103.
- Imry, Y. (1997). *Introduction to Mesoscopic Physics*. Oxford U.P., Oxford.
- Ingold, G.-L. and Nazarov, Y. (1992). Charge tunneling rates in ultrasmall junctions. pp. 21-108 in *Single Charge Tunneling (Coulomb Blockade Phenomena in Nanostructures)* edited by H. Grabert and M.H. Devoret, Plenum, New York.
- Iqbal, M. J., Reuter, D., Wieck, A. D., and van der Wal, C. H. (2014). Robust recipe for low-resistance ohmic contacts to a two-dimensional electron gas in a gaas/algaas heterostructure. *arXiv:1407.4781v1 [cond-mat.mes-hall]*.
- Jagla, E. A. and Balseiro, C. A. (1993). Electron-electron correlations and the aharonov-bohm effect in mesoscopic rings. *Phys. Rev. Lett.*, 70:639.
- Jamneala, T., Madhavan, V., and Crommie, M. F. (2001). Kondo response of a single antiferromagnetic chromium trimer. *Phys. Rev. Lett.*, 87:256804.
- Jarillo-Herrero, P., Kong, J., van der Zant, H. S., Dekker, C., Kouwenhoven, L. P., and Franceschi, S. D. (2005). Orbital kondo effect in carbon nanotubes. *Nature (London)*, 434:484.
- Jarillo-Herrero, P., Sapmaz, S., Dekker, C., Kouwenhoven, L. P., and van der Zant, H. S. J. (2004). Electron-hole symmetry in a semiconducting carbon nanotube quantum dot. *Nature (London)*, 429:389.
- Jeong, H., Chang, A. M., , and Meloch, M. R. (2001). The kondo effect in an artificial quantum dot molecule. *Science*, 293:2221.
- Kang, K. and Shin, S.-C. (2000). Mesoscopic kondo effect in an aharonov-bohm ring. *Phys. Rev. Lett.*, 85:5619.
- Kastner, M. (1992). The single-electron transistor. *Rev. Mod. Phys.*, 64:849.
- Kastner, M. (1993). Artificial atoms. *Phys. Today*, 46:24.
- Kastner, M. (2000). The single electron transistor and artificial atoms. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 9:885.
- Kawayami, N. and Okiji, A. (1981). Exact expression of the ground-state energy for the symmetric anderson model. *Phys. Lett.*, 86A:483.

- Keldysh, L. V. (1964). no title. *Sov. Phys. JETP*, 20:1347.
- Keller, A. J., Amasha, S., I.Weymann, Moca, C. P., Rau1, I. G., Katine, J. A., Shtrikman, H., Zaránd, G., and Goldhaber-Gordon, D. (2014). Emergent $su(4)$ kondo physics in a spin-charge-entangled double quantum dot. *Nature Physics*, 10:145.
- Kim, Y., Song, H., Strigl, F., Pernau, H.-F., Lee, T., and Scheer, E. (2011). Conductance and vibrational states of single-molecule junctions controlled by mechanical stretching and material variation. *Phys. Rev. Lett.*, 106:196804.
- Kondo, J. (1964). Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress in Theoretical Physics*, 32:37–49.
- König, J. and Gefen, Y. (2001). Coherence and partial coherence in interacting electron systems. *Phys. Rev. Lett.*, 86:3855.
- König, J., Schoeller, H., and Schön, G. (1996). Zero-bias anomalies and boson-assisted tunneling through quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 76:1715.
- Koop, E. J., Iqbal, M. J., Limbach, F., Boute, M., vanWees, B. J., Reuter, D., Wieck, A. D., Kooi, B. J., and van derWal, C. H. (2013). On the annealing mechanism of auge/ni/au ohmic contacts to a two-dimensional electron gas in gaas/alxga1-xas heterostructures. *Semicond. Sci. Technol.*, 28:025006.
- Kouwenhoven, L., Austing, D. G., and Tarucha, S. (2001). Few-electron quantum dots. *Rep. Prog. Phys.*, 64:701.
- Kouwenhoven, L. and Glazman, L. (2001). Revival of the kondo effect. *Physics World*, January:33.
- Kouwenhoven, L. and Marcus, C. (1998). Quantum dots. *Physics World*, 11:35.
- Kouwenhoven, L. P., Hekking, F. W. J., van Wees, B. J., Harmans, C. J. P. M., Timmering, C. E., and Foxon, C. T. (1990). Transport through a finite one-dimensional crystal. *Phys. Rev. Lett.*, 65:361.
- Kouwenhoven, L. P., Marcus, C. M., Mceuen, P. L., Tarucha, S., Westervelt, R. M., and Wingreen, N. S. (1997). *Electron Transport in Quantum Dots*. Kluwer.
- Krishna-murthy, H. R., Wilkins, J. W., and Wilson, K. G. (1980a). Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. i. static properties for the symmetric case. *Phys. Rev. B*, 21:1003.
- Krishna-murthy, H. R., Wilkins, J. W., and Wilson, K. G. (1980b). Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. ii. static properties for the asymmetric case. *Phys. Rev. B*, 21:1044.

- Kroha, J. and Wölfle, P. (1998). Fermi and Non-Fermi liquid behavior in quantum impurity systems: conserving slave bosons theory. *Acta Physica Polonica B*, 29:3781.
- Kubatkin, S., Danilov, A., Hjort, M., Cornil, J., Brédas, J.-L., Stuhr-Hansen, N., rd, P. H., and rnholm, T. B. (1998). Dephasing in electron interference by a 'which-path' detector. *Nature*, 391:871.
- Kubatkin, S., Danilov, A., Hjort, M., Cornil, J., Brédas, J.-L., Stuhr-Hansen, N., rd, P. H., and rnholm, T. B. (2003). Single-electron transistor of a single organic molecule with access to several redox states. *Nature*, 425:698.
- Landauer, R. (1970). Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. *Philosophical Magazine*, 21:863.
- Langreth, D. C. (1966). Friedel sum rule for anderson's model of localized impurity states. *Physical Review*, 150:516–518.
- Langreth, D. C. (1967). *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids, Vol.17 of NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics edited by J.T. Devreese and V.E. Van Doren*. Plenum, New York.
- Laughlin, H. B. (1983). Anomalous quantum hall effect: An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1395.
- Liang, W., Shores, M. P., Bockrath, M., Long, J. R., and Park, H. (2002). Kondo resonance in a single-molecule transistor. *Nature (London)*, 417:725.
- Lobos, A. M. and Aligia, A. A. (2008). Effects of interactions in transport through aharonov-bohm-casher interferometers. *Physical Review Letters*, 100:016803.
- MacDonald, A. H. (1991). *The Quantum Hall Effects in Quantum Coherence in Mesoscopic Systems (ed. B. Kramer)*. Plenum Press, New York.
- Mahan, G. D. (2000). *Many-Particle Physics (Third Edition)*. Springer.
- Manoharan, H. C., Lutz, C. P., and Eigler, D. M. (2000). Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature (London)*, 403:512.
- Martin, C.-O. A. (2010). *Inelastic mechanisms in mesoscopic circuits realized in two dimensional electron gases*. PhD thesis, Faculté des sciences d'Orsay, Université Paris-Sud 11.
- Martin-Rodero, A., Yeyati, A. L., Flores, F., and Monreal, R. C. (2008). Interpolative approach for electron-electron and electron-phonon interactions: From the kondo to the polaronic regime. *Phys. Rev. B*, 78:235112.

- Meir, Y. and Wingreen, N. S. (1991). Transport through a strongly interacting electron system: Theory of periodic conductance oscillations. *Phys. Rev. Lett.*, 66:3048.
- Meir, Y. and Wingreen, N. S. (1992). Landauer Formula for the Current through an Interacting Region. *Phys. Rev. Lett.*, 68:2512.
- Meir, Y., Wingreen, N. S., and Lee, P. A. (1993). Low-temperature transport through a quantum dot: The anderson model out of equilibrium. *Phys. Rev. Lett.*, 70:2601.
- Melloch, M. R. (1993). Molecular beam epitaxy for high electron mobility modulation-doped two-dimensional electron gases. *Thin Solid Films*, 231:74.
- Monreal, R. C., Flores, F., and Martin-Rodero, A. (2010). Nonequilibrium transport in molecular junctions with strong electron-phonon interactions. *Phys. Rev. B*, 82:235412.
- Monreal, R. C. and Martin-Rodero, A. (2009). Equation of motion approach to the anderson-holstein hamiltonian. *Phys. Rev. B*, 79:115140.
- Nagaoka, K., Jamneala, T., Grobis, M., and Crommie, M. F. (2002). Temperature dependence of a single kondo impurity. *Phys. Rev. Lett.*, 88:077205.
- Nazarov, Y. and Blanter, Y. (2009). *Quantum Transport, Introduction to Nanoscience*. Cambridge University Press.
- Ng, T. K. and Lee, P. A. (1988). On-site coulomb repulsion and resonant tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 61:1768.
- Nichols, R. J. and Higgins, S. J. (2012). Interference comes into view. *Nature Nanotechnology*, 7:281.
- Nitzan, A. and Ratner, M. A. (2003). Electron transport in molecular wire junctions. *Science*, 300:1384.
- Novoselov, K. S., Fal'ko, V. I., Colombo, L., Gellert, P. R., Schwab, M. G., and Kim, K. (2012). A roadmap for graphene. *Nature*, 490:192.
- Nygård, J., Cobden, D. H., and Lindelof, P. E. (2000). Kondo physics in carbon nanotubes. *Nature (London)*, 408:342.
- Okazaki, Y., Sasaki, S., and Muraki, K. (2011). Spin-orbital kondo effect in a parallel double quantum dot. *Phys. Rev. B*, 84:161305(R).
- Okiji, A. and Kawakami, N. (1983). Thermodynamic properties of the anderson model. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1157.
- Paaske, J. and Flensberg, K. (2005). Vibrational sidebands and the kondo effect in molecular transistors. *Phys. Rev. Lett.*, 94:176801.

- Park, H., Park, J., Lim, A. K. L., Anderson, E. H., Alivisatos, A. P., and McEuen, P. L. (2000). Nano-mechanical oscillations in a single-c60 transistor. *Nature (London)*, 407:57.
- Park, J., Pasupathy, A. N., Goldsmith, J. I., Chang, C., Yaish, Y., Petta, J. R., Rinkoski, M., Sethna, J. P., na, H. D. A., McEuen, P. L., and Ralph, D. C. (2002). Kondo resonance in a single-molecule transistor. *Nature (London)*, 417:722.
- Parks, J. J., Champagne, A. R., Costi, T. A., Shum, W. W., Pasupathy, A. N., Neuscamman, E., Flores-Torres, S., Cornaglia, P. S., Aligia, A. A., Balseiro, C. A., Chan, G. K.-L., na, H. D. A., and Ralph, D. C. (2010). Mechanical control of spin states in spin-1 molecules and the underscreened kondo effect. *Science*, 328:1370.
- Petta, J. R., Johnson, A. C., Taylor, J. M., E. A. Laird, A. Y., Lukin, M. D., Marcus, C. M., Hanson, M. P., and Gossard, A. C. (2005). Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. *Science*, 309:2180.
- Pohjola, T., Schoeller, H., and Schön, G. (2001). Orbital and spin kondo effects in a double quantum dot. *Europhys. Lett.*, 54:241.
- Prange, R. E. and Girvin, S. M. (1987). *The Quantum Hall effect*. Springer-Verlag.
- Rakhmievitch, D., Korytár, R., Bagrets, A., Evers, F., and Tal, O. (2014). Electron-vibration interaction in the presence of a switchable kondo resonance realized in a molecular junction. *Phys. Rev. Lett.*, 113:236603.
- Reed, M. A. (1993). Quantum dots. *Scientific American*, January:118.
- Reed, M. A., Zhou, C., Muller, C. J., Burgin, T. P., and Tour, J. M. (1997). Conductance of a molecular junction. *Science*, 278:252.
- Rincón, J., Hallberg, K., Aligia, A. A., and Ramasesha, S. (2009). Quantum interference in coherent molecular conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 103:266807.
- Roch, N., Florens, S., Bouchiat, V., Wernsdorfer, W., and Balestro, F. (2008). Quantum phase transition in a single-molecule quantum dot. *Nature (London)*, 453:633.
- Roch, N., Florens, S., Costi, T. A., Wernsdorfer, W., and Balestro, F. (2009). Observation of the underscreened kondo effect in a molecular transistor. *Phys. Rev. Lett.*, 103:197202.
- Roura-Bas, P., Tosi, L., and Aligia, A. A. (2012a). Nonequilibrium conductance through a benzene molecule in the kondo regime. *J. Phys. Condens. Matter*, 24:365301.

- Roura-Bas, P., Tosi, L., and Aligia, A. A. (2013). Nonequilibrium transport through magnetic vibrating molecules. *Phys. Rev. B*, 87:195136.
- Roura-Bas, P., Tosi, L., Aligia, A. A., and Cornaglia, P. S. (2012b). Thermopower of an $su(4)$ kondo resonance under an $su(2)$ symmetry-breaking field. *Phys. Rev. B*, 86:165106.
- Roura-Bas, P., Tosi, L., Aligia, A. A., and Hallberg, K. (2011). Interplay between quantum interference and kondo effects in nonequilibrium transport through nanoscopic systems. *Phys. Rev. B*, 84:073406.
- Sankar Das Sarma, A. P. (2004). *Perspectives in Quantum Hall Effects: Novel Quantum Liquids in Low-Dimensional Semiconductor Structures*. WILEY-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA.
- Sasaki, S., Amaha, S., Asakawa, N., Eto, M., and Tarucha, S. (2004). Enhanced kondo effect via tuned orbital degeneracy in a spin $1=2$ artificial atom. *Phys. Rev. Lett.*, 93:017205.
- Sasaki, S., Franceschi, S. D., Elzerman, J. M., van der Wiel, W. G., Eto, M., Tarucha, S., and Kouwenhoven, L. P. (2000). Kondo effect in an integer-spin quantum dot. *Nature*, 405:764.
- Schmid, J., Weis, J., Eberl, K., and v. Klitzing, K. (1999). Absence of odd-even parity behavior for kondo resonances in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 84:5824.
- Seo, M., Choi, H. K., Lee, S.-Y., Kim, N., Chung, Y., Sim, H.-S., Umansky, V., and Mahalu2, D. (2013). Charge frustration in a triangular triple quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 110:046803.
- Simmel, F., Blick, R. H., Kotthaus, J. P., Wegscheider, W., and Bichler, M. (1999). Anomalous kondo effect in a quantum dot at nonzero bias. *Phys. Rev. Lett.*, 83:804.
- Smit, R. H. M., Noat, Y., Untiedt, C., Lang, N. D., van Hemert, M. C., and van Ruitenbeek, J. M. (2002). Measurement of the conductance of a hydrogen molecule. *Nature (London)*, 419:906.
- Solomon, G. C., Herrmann, C., Hansen, T., Mujica, V., and Ratner, M. A. (2010). Exploring local currents in molecular junctions. *Nature Chemistry*, 2:223.
- Stafford, C. A., Cardamone, D. M., and Mazumdar, S. (2007). The quantum interference effect transistor. *Nanotechnology*, 18:424014.
- Steele, G. A., Gotz, G., and Kouwenhoven, L. P. (2009). Tunable few-electron double quantum dots and klein tunnelling in ultraclean carbon nanotubes. *Nature Nanotechnology*, 4:363.

- Stewart, D. R. (1999). *Level spectroscopy of a quantum dot*. PhD thesis, Stanford University.
- Stone, M. (1992). *Quantum Hall Effect*. World Scientific.
- Stormer, H. L. (1999). Nobel lecture: The fractional quantum hall effect. *Reviews of Modern Physics*, 71:875.
- Stormer, H. L., Tsui, D. C., and Gossard, A. C. (1999). The fractional quantum hall effect. *Reviews of Modern Physics*, 71:298.
- Switkes, M. (1999). *Decoherence and adiabatic transport in semiconductor quantum dots*. PhD thesis, Stanford University.
- Tao, N. J. (2006). Electron transport in molecular junctions. *Nature Nanotechnology*, 1:173.
- Taylor, R. P., Coleridge, P. T., Davies, M., Feng, Y., McCaffrey, J. P., and Marshall, P. A. (1994). Physical and electrical investigation of ohmic contacts to aigaas/gaas heterostructures. *J. Appl. Phys.*, 76:7966.
- Tettamanzi, G. C., Verduijn, J., Lansbergen, G. P., Blaauboer, M., Calderón, M. J., Aguado, R., and Rogge, S. (2012). Magnetic-field probing of an $su(4)$ kondo resonance in a single-atom transistor. *Phys. Rev. Lett.*, 108:046803.
- Tosi, L. (2010). Técnicas diagramáticas en transporte a través de sistemas nanoscópicos altamente correlacionados. Master's thesis, Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo.
- Tosi, L. and Aligia, A. A. (2011). Spin selective transport through aharonov-bohm and aharonov-casher triple quantum dot systems. *Physica Status Solidi B*, 248:732.
- Tosi, L., Bas, P. R., and Aligia, A. A. (2012a). Transition between $su(4)$ and $su(2)$ kondo effect. *Physica B: Condensed Matter*, 407:3259.
- Tosi, L., Bas, P. R., Llois, A. M., and Aligia, A. A. (2012b). Out of equilibrium anderson model: Conductance and kondo temperature. *Physica B: Condensed Matter*, 407:3263.
- Tosi, L., Bas, P. R., Llois, A. M., and Manuel, L. O. (2011). Effect of vertex corrections on diagrammatic approximations applied to the study of transport through a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 83:073301.
- Tosi, L., Roura-Bas, P., and Aligia, A. A. (2013). Orbital kondo spectroscopy in a double quantum dot system. *Phys. Rev. B*, 88:235427.
- Tosi, L., Roura-Bas, P., and Aligia, A. A. (2015). Restoring the $su(4)$ kondo regime in a double quantum dot system. *sent to Phys. Rev. B*.
- Tsui, D. C., Stormer, H. L., and Gossard, A. C. (1982). Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1559.

- v. Klitzing, K., Dorda, G., and Pepper, M. (1980). New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494.
- Valkenier, H., Guédon, C. M., Markussen, T., Thygesen, K. S., van der Molen, S. J., and Hummelen, J. C. (2014). Cross-conjugation and quantum interference: a general correlation? *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16:653.
- van der Wiel, W. G., de Franceschi, S., Fujisawa, T., Elzerman, J. M., Tarucha, S., and Kouwenhoven, L. P. (2000). The kondo effect in the unitary limit. *Science*, 289:2105.
- van der Wiel, W. G., Franceschi, S. D., Elzerman, J. M., Fujisawa, T., Tarucha, S., and Kouwenhoven, L. P. (2003). Electron transport through double quantum dots. *Rev. Mod. Phys.*, 75:1.
- van Houten, H. and Beenakker, C. (1996). Quantum point contacts. *Physics Today*, July:22.
- van Wees, B., van Houten, H., Beenakker, C., Williamson, J., Kouwenhoven, L., van der Marel, D., and Foxon, C. (1988). Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 60:848.
- Vazquez, H., Skouta, R., Schneebeli, S., Kamenetska, M., Breslow, R., Venkataraman, L., and Hybertsen, M. (2012). Probing the conductance superposition law in single-molecule circuits with parallel paths. *Nature Nanotechnology*, 7:663.
- Venkataraman, L., Klare, J. E., Nuckolls, C., Hybertsen, M. S., and Steigerwald, M. L. (2006). Dependence of single-molecule junction conductance on molecular conformation. *Nature (London)*, 442:904.
- von Klitzing, K. (1986). The quantized hall effect. *Reviews of Modern Physics*, 58:519.
- von Klitzing, K. (2004). 25 years of quantum hall effect (qhe). a personal view on the discovery, physics and applications of this quantum effect. *Séminaire Poincaré*, 2:1–16.
- Waugh, F. R., Berry, M. J., Mar, D. J., Westervelt, R. M., Campman, K. L., and Gossard, A. C. (1995). Single-electron charging in double and triple quantum dots with tunable coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 75:705.
- Webb, R. A., Washburn, S., Umbach, C. P., and Laibowitz, R. B. (1985). Observation of h/e aharonov-bohm oscillations in normal-metal rings. *Phys. Rev. Lett.*, 54:2696.
- Wharam, D., Thornton, T., Newbury, R., Pepper, M., Ahmed, H., Frost, J., Hasko, D., Peacock, D., Ritchie, D., and Jones, G. (1988). One-dimensional transport and the quantization of the ballistic resistance. *J. Phys. C*, 21:209.

- Wick, G. C. (1950). The evaluation of the collision matrix. *Physical Review*, 80:268–272.
- Wiegmann, P. B. (1980). Towards an exact solution of the anderson model. *Phys. Lett.*, 80A:163.
- Wilhelm, U., Schmid, J., Weis, J., and Klitzing, K. (2002). Experimental evidence for spinless kondo effect in two electrostatically coupled quantum dot systems. *Physica E*, 14:385.
- Wilson, K. G. (1975). The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Review Modern Physics*, 47:773–840.
- Wingreen, N. S. and Meir, Y. (1994). Anderson model out of equilibrium: Noncrossing-approximation approach to transport through a quantum dot. *Physical Review B*, 49:11040–11052.
- Xu, B. and Tao, N. J. (2003). Measurement of single-molecule resistance by repeated formation of molecular junctions. *Science*, 301:1221.
- Y. Ji, M. H., Sprinzak, D., Mahalu, D., , and Shtrikman, H. (2000). Phase evolution in a kondo-correlated system. *Science*, 290:779.
- Yafet, Y. and Varma, C. M. (1985). Ground state of an ion fluctuating between two magnetic valence states. *Physical Review B*, 32:360.
- Yeyati, A. L. (2010). Teoría de perturbaciones fuera de equilibrio. Notas asociadas al Curso “Quantum Transport in Atomic Size Conductors”.
- Yong, H.-C., Kai-Hua, Y., and Guang-Shan, T. (2007). Ac conductance through a vibrating molecular dot in kondo regime. *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)*, 48:1107.
- Yu, H., Wen, T.-D., Liangb, J.-Q., and Sunc, Q. (2008). Phonon-assisted kondo effect in single-molecule quantum dots coupled to ferromagnetic leads. *Physics Letters A*, 372:6944.
- Zaffalon, M., Bid, A., Heiblum, M., Mahalu, D., and Umansky, V. (2008). Transmission phase of a singly occupied quantum dot in the kondo regime. *Physical Review Letters*, 100:226601.
- Zhitenev, N. B., Meng, H., and Bao, Z. (2002). Conductance of small molecular junctions. *Phys. Rev. Lett.*, 88:226801–1.

Agradecimientos

(...) Au moindre coup de Trafalgar
C'est l'amitié qui prenait l'quart
C'est elle qui leur montrait le nord
Leur montrait le nord
Et quand ils étaient en détresse
Qu'eux bras lançaient des S.O.S.
On aurait dit des sémaphores
Les copains d'abord.

Au rendez-vous des bons copains
Y avait pas souvent de lapins
Quand l'un d'entre eux manquait 'a bord
C'est qu'il était mort
Oui, mais jamais, au grand jamais
Son trou dans l'eau n'se refermait
Cent ans après, coquin de sort
Il manquait encore

Des bateaux j'en ai pris beaucoup
Mais le seul qui ait tenu le coup
Qui n'ait jamais viré de bord
Mais viré de bord
Naviguait en père peinard
Sur la grand-mare des canards
Et s'app'lait les Copains d'abord
Les Copains d'abord

Les Copains d'Abord, **George Brassens**.

Tesis: A los Jurados: Luis Foa Torres, Luis O. Manuel, Pablo S. Cornaglia. A Gonzalo Usaj por la revisión. A Armando Aligia y Pablo Roura-Bas por la dirección y el trabajo en equipo. A Hernán Pastoriza.

A Ezequiel Tosi, Mauricio Tosi, Perla Courtade y P. Sesin por las correcciones.

En Bariloche: Al grupo de teoría de Solidos: Carlos Balseiro, Karen Hallberg, Jorge SimonÃn, Roberto Allub, Maria JosÃ© Sanchez, Eduardo Jagla, Daniel Dominguez, Sebastián Bustingorry, Alejandro Kolton, Daniel GarÃa, Alexandre das-Neves, Pablo Cornaglia. A los que mantienen el cluster, a los que organizan los asados, a la buena salida en la Angostura donde jugamos al ping-pong.

A los chicos del grupo: JosÃ© Querales, Ivonne Buitrago, JoaquÃn, Robert GuzmÃn.

En Especial a Carlos Balseiro, Gonzalo Usaj y Pablo Cornaglia.

Al grupo de Bajas Temperaturas. En Especial a Hernán Pastoriza, Pablo Pedrazzini. A Julio Guimpel por el proyecto ECOS. A los técnicos Pablo Cárdenas, Santiago Hansen, Gerardo Burmeister, Rodolfo Fuentes, Julian Ascarate, Nacho.

A Juan Zárate por todo ese saber inicial.

A los amigos del labo: Sergio Encina por las tardes-noches de medicina ³nendilusi³nyeseinolvidable

A Karim, Diego, Renzo, Diego Franco, Ana, Diana, a victoria.

A todos los docentes del instituto Balseiro. En especial a Damian Zanette, Eduardo Jagla, Daniel Dominguez, Guillermo Zampieri, Javier Luzuriaga, Armando Aliaga, Gonzalo Usaj, Victor Correa, Pablo Cornaglia con los que compartimos cátedras.

A todos los estudiantes que me tuvieron que sufrir como profe/ayudante. En realidad era yo el que estaba aprendiendo de ellos.

A Marialuz Martiarena.

A Odile Galimard y Ana Pedrazzini por las clases de Francés.

A Nadim.

A mis hermanos

A mis padres.

A Natalia, Renata y Sofia

A las "viejas de Historia": Pame, Pao, Cris, Ana. Y desde luego a sus crios Lupe, Fermán y Gaspar, Nico y Dante.

A los amigos: Silvia Martinez, la gente de la Multisectorial: Caro Alac, German de Hijos, Susana Pacheco, Ruben Pandiani, J.C. Quevedo, Susana Lara, Marga, Karina Riquelme. A la gente con la que compartimos Trabajo de Hormiga: Oscar Moreno, Silvia Contreras y Flavia Mieres. A los compañeros de izquierda socialista : Rodolfo Sanchez, Ruben, Cristina, Martny Ayelén. A Mechupore inolvidable viaja Buenos Aires

A Armando y a Silvia.

A Natalia por la luz del yoga. A Marcela Romero por hacerme mover el kundalini.

Al volcán Puyehue que erupcionó en el 2011 y me permitió dedicarme a la teora...

En Tucumán:

A Pedro Gomez, Sofia Jaimovich, Flia Tosi, Agostina Tosi. Flia Courtade. Tía Gisselle. A Susuana Stein y Niels Giori. A Sandra Juarez. A David Comedi y Gustavo Grinblat. A Ramiro que me permitió acompañarlo durante su etapa, dándole los primeros pasos en la vida.

En Buenos Aires: A Florencia Grinblat, Fernando Sesma, Erika Rodriguez.

A Paula Giudici, Liliana Arrachea, Germán y ...

A Ana María Llois.

En Barcelona: A Pablo y Marta. A Simón.

En el cielo: A Eduardo Osquiguil.

En Francia: A Cristian Urbina, Hughes Pothier, Marcelo Goffman, Phillipe Joyez, Daniel Esteve, Denis Vion, Patrice Betet, Pascal Senat, Pief Orfila de Quantro nic. Patrice Roche, Carles Altimiras, Fabian Portier, Benoit, Cristian Glatli.

A Caglar Girit, Landry Bertheau, J-D Pillet, A. Dewes, Camille Janvier, Olivier, Helene Le Sueuer et Ahinoa. A Xin et Yui.

A Ulf Genser

A Maria, Odile et Max Pothier, a Katrin. A Claire, Uzai, Lou et Gin Girit. A Fernanda Goffman, a Silvia.

A Valerie et les copains de Lutte Ouvriere.

A Maryse Cohen qui m'a lodgado.

A Quique Godfrin, Andres Jarach, Themo Anargyros.